N° D'ENREGISTREMENT
AU C. N. R. S.
A. O. 1659

ARTICLE PRINCIPAL

recouvrant en tout

LA THÈSE DE DOCTORAT ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE PARIS

PAR

Mademoiselle Yvette CUNY

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR ÈS SCIENCES

Sujet de la thèse : Détermination exacte de la structure stationnaire d'une atmosphère d'hydrogène. Problème hors de l'équilibre thermodynamique local.

Soutenue le 20 juin 1967 devant la Commission d'examen :

MM. SCHATZMAN *Président.*

KOURGANOFF, PECKER } *Examinateurs.*

ÉDITIONS DU CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
15, Quai Anatole-France
PARIS 7e

N° D'ENREGISTREMENT
AU C. N. R. S
A O 1659

ARTICLE PRINCIPAL

recouvrant en tout

LA THÈSE DE DOCTORAT ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE PARIS

PAR

Mademoiselle Yvette CUNY

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR ÈS SCIENCES

Sujet de la thèse : Détermination exacte de la structure stationnaire d'une atmosphère d'hydrogène. Problème hors de l'équilibre thermodynamique local.

Soutenue le 20 juin 1967 devant la Commission d'examen :

MM. SCHATZMAN *Président.*

KOURGANOFF, PECKER } *Examinateurs.*

ÉDITIONS DU CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
15, Quai Anatole-France
PARIS 7e

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

DÉTERMINATION EXACTE DE LA STRUCTURE STATIONNAIRE D'UNE ATMOSPHÈRE D'HYDROGÈNE

Problème hors de l'équilibre thermodynamique locale

Y. CUNY

Observatoire de Meudon, 92-Meudon

Résumé. — *L'étude théorique des écarts à l'équilibre thermodynamique local dans une atmosphère stellaire conduit à résoudre simultanément les équations d'équilibre statistique et les équations de transfert du rayonnement. Ce travail est consacré à l'étude de la résolution de ces deux systèmes d'équations couplés.*

Dans le premier chapitre nous rappelons les expressions classiques des nombres de processus radiatifs et collisionnels d'excitation et de desexcitation des atomes, par centimètre cube et par seconde, ainsi que celles des coefficients d'absorption et d'émission, et nous formulons les équations d'équilibre statistique.

Dans le second chapitre nous rappelons l'expression de la fonction source d'une transition obtenue à partir des coefficients des équations d'équilibre statistique et nous formulons les équations différentielles du transfert du rayonnement. Ces équations peuvent être linéarisées partiellement pour un ensemble de transitions de même niveau inférieur.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la méthode d'intégration numérique du système d'équations différentielles linéaires du transfert du rayonnement.

L'étude de la non-microréversibilité des processus radiatifs traitée dans le quatrième chapitre permet d'expliquer les solutions des équations de transfert du rayonnement, en particulier aux grandes profondeurs, et montre quelle est l'influence des profils d'absorption et d'émission sur ces solutions.

Les procédés itératifs utilisés pour résoudre complètement les deux systèmes d'équations couplés de l'équilibre statistique et du transfert du rayonnement sont décrits dans le cinquième chapitre.

Nous terminons en appliquant la méthode à un milieu plan parallèle semi-infini composé d'hydrogène pur à pression et température constantes. Nous traitons les cas d'un atome à un, deux et trois niveaux et étudions le couplage entre les transitions.

Summary. — *Theoretical study of the departures from local thermodynamic equilibrium in a stellar atmosphere leads to the simultaneous resolution of the equations of statistical equilibrium and the equations of transfer of radiation. This study deals with the resolution of these two coupled systems of equations.*

In the first chapter, after giving the classical expressions for the number of atomic collisional and radiative excitation and de-excitation processes per cubic centimeter second, as well as those for the absorption and emission coefficients, we formulate the statistical equilibrium equations.

In the second chapter, we recall the expression of the source function in a line which is derived from the coefficients of the statistical equilibrium equation, and we formulate the differential radiative transfer equations. These equations may be linearized in part, for a set of transitions originating in the same lower level.

Chapter three deals with the method of numerical integration of the system of linear differential equations of radiative transfer.

In our study of the non-microreversibility of the radiative processes, in chapter four, we explain the solutions of the equations of transfer, particularity at great depths, and we show the influence of the absorption and emission profiles on these solutions.

In chapter five we describe the iterative procedures we have used to solve completely the two coupled systems of equations of statistical equilibrium and of radiative transfer.

Finally we apply the method to a semi-infinite plane parallel medium, of pure hydrogen at constant temperature and pressure. We treat the case of a one, — two — and three level atom, and study the coupling between the transitions.

Introduction

Le calcul des modèles et des spectres des sources étudiées en Astrophysique, étoiles, nébuleuses planétaires, nébuleuses galactiques, etc..., nécessite la résolution des équations linéaires de l'équilibre statistique, exprimant dans le cas d'un état stationnaire la constance des populations des différents niveaux d'énergie des atomes, et la résolution du système des équations différentielles du transfert du rayonnement pour l'ensemble des transitions des atomes.

La résolution de ces deux systèmes d'équations couplés est simplifiée lorsque l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local est valable, c'est-à-dire lorsque le milieu est suffisamment dense, comme c'est le cas, en première approximation, des photosphères d'étoiles. Les rapports des populations des différents niveaux d'énergie d'un atome sont alors donnés en fonction de la température cinétique locale des électrons par les lois de Boltzmann-Saha et la répartition des vitesses des particules par la loi de Maxwell. Il s'en suit que la fonction source des transitions radiatives est égale à la fonction de Planck.

Lorsque le milieu est dilué (chromosphère d'étoile, nébuleuse) les processus collisionnels d'excitation et de désexcitation des atomes ne sont plus prépondérants par rapport aux processus radiatifs, les champs de rayonnement n'ont pas la valeur donnée par l'équilibre thermodynamique : l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local n'est plus valable. L'étude systématique des problèmes des écarts à l'équilibre thermodynamique a été entreprise par Jefferies et Thomas qui ont repris la définition des coefficients d'écarts à l'équilibre thermodynamique local introduite par Menzel (1937) lors d'une étude des nébuleuses planétaires. Thomas (1957) a en particulier étudié le couplage entre les équations de transfert du rayonnement et les équations de l'équilibre statistique pour un atome à deux niveaux, donné dans ce cas l'expression de la fonction source, expression qui est généralisable à une transition quelconque d'un atome à plusieurs niveaux, analysé le phénomène de diffusion cohérente et incohérente. Dans le cas d'un atome à deux niveaux, Thomas et Jefferies (1958, 1959, 1960) ont résolu dans des cas simples (équations à coefficients constants, représentation analytique de la fonction source du rayonnement continu) les équations de transfert et montré la différence entre les fonctions source des transitions entre niveaux discrets déterminées par les processus collisionnels ou les processus de photoionisation.

Une difficulté essentielle de l'étude des écarts à l'équilibre thermodynamique local est la résolution des équations de transfert du rayonnement ; le calcul de modèles de photosphères d'étoiles, même avec l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local et également le calcul d'intérieurs d'étoiles présentent une difficulté analogue.

Les équations de transfert du rayonnement peuvent être écrites soit sous la forme d'une équation intégrale, soit sous la forme d'un système d'équations différentielles couplées. L'équation intégrale a d'abord été utilisée ; il a été démontré par Thomas (1965), ainsi que par Avrett et Hummer (1965), que la méthode itérative de Neumann ne convergeait pas ; Avrett et Hummer (1965) et Avrett (1965, 1966) ont obtenu des résultats, toujours en résolvant l'équation intégrale du transfert, dans des cas simples, où les divers paramètres physiques, en particulier les profiles d'absorption et d'émission, sont indépendants de la profondeur : dans les applications réelles, lorsque les paramètres physiques sont variables avec la profondeur, cette méthode semble peu maniable.

La tendance actuelle est d'essayer de résoudre les équations différentielles du transfert dont la formulation est simple ; l'inconvénient est qu'il existe peu de méthodes d'intégration numérique stables pour intégrer un tel système dont les valeurs initiales sont données en deux points de l'intervalle d'intégration. Un progrès important a été apporté par l'utilisation de la méthode d'intégration numérique de Fox (1957). On trouvera dans l'article de Wrubel (1963), « Construction of Stellar Model », une revue des différentes méthodes numériques utilisées pour le calcul d'intérieurs d'étoiles, parmi lesquelles celle de Fox. Cette méthode a été adaptée aux équations de transfert du rayonnement dans les couches superficielles d'une étoile par Feautrier (1964). Usher (1964) et Rybicki (1965) ont également mis au point une autre méthode d'intégration numérique. Nous utiliserons dans cet article, la méthode de Feautrier.

Nous nous proposons donc, un modèle étant donné par la composition chimique et par les variations de la température et de la pression en fonction de l'altitude, d'étudier la résolution simultanée des équations de transfert du rayonnement et des équations de l'équilibre statistiques pour un atome à plusieurs niveaux.

Dans cet article consacré à l'étude de la méthode nous étudierons, comme exemple, le cas d'un milieu

plan parallèle semi-infini à température et à pression constantes.

Nous traiterons dans les différents chapitres les questions suivantes :

1) Formulation des équations d'équilibre statistique et des coefficients d'absorption et d'émission.

2) Équations du transfert du rayonnement. Linéarisation partielle.

3) Méthode d'intégration numérique des équations de transfert.

4) Étude de la non-microréversibilité des processus radiatifs. Profondeur optique limite d'intégration. Largeur utile des profils.

5) Procédés itératifs utilisés pour résoudre l'ensemble des systèmes d'équations couplées du transfert du rayonnement et de l'équilibre statistique.

6) Application — Milieu plan parallèle semi-infini composé d'hydrogène pur à température et à pression constantes. Étude du couplage entre les transitions — Avantages et inconvénients des différents procédés itératifs.

Nous avons rédigé cet article en pensant à l'hydrogène, mais la majeure partie des résultats est valable pour les autres atomes. Nous publierons ultérieurement des applications concernant l'Astrophysique : chromosphères solaires, et de façon plus générale stellaires, nébuleuses planétaires, etc... Déjà dans cet article qui ne traite que de la méthode, nous signalons quelques difficultés rencontrées lors de l'étude de la chromosphère solaire.

I. ÉQUATIONS DE L'ÉQUILIBRE STATISTIQUE EXPRESSIONS DES COEFFICIENTS D'ABSORPTION ET D'ÉMISSION.

Dans ce chapitre nous rappellerons les expressions maintenant classiques (MILNE, 1930 ; THOMAS, 1957) des nombres de processus radiatifs et collisionnels d'excitation et de désexcitation des atomes, par unité de temps et par unité de volume, ainsi que celles des coefficients d'absorption et d'émission, et nous formulerons les équations d'équilibre statistique.

1) *Processus collisionnels.*

Les chocs avec les particules environnantes, ici les électrons, peuvent produire l'excitation et l'ionisation de l'atome et les modifications inverses : désexcitation et recombinaison.

a) Excitations par collisions. — Le nombre d'excitations par seconde du niveau j au niveau k sous l'action de dN_e électrons dont la vitesse relative par rapport aux atomes d'hydrogène est comprise entre v et $v + dv$, est :

$$dN_{jk} = N_j \, Q_{jk}(v) \, v \, dN_e. \tag{1}$$

$Q_{jk}(v)$ désignant la section de choc de la transition jk, N_j la population du niveau d'excitation j.

Le nombre total d'atomes excités du niveau j au niveau k, sous l'action des chocs électroniques, est donc, par centimètre cube et par seconde :

$$N_{jk} = N_j \int_{v_{jk}}^{\infty} Q_{jk}(v) \, v \, dN_e, \tag{2}$$

$$= N_j \, C'_{jk}.$$

La vitesse seuil v_{jk} est définie par l'équation :

$$\frac{1}{2} m v_{jk}^2 = W_{jk} = W_j - W_k, \tag{3}$$

où m désigne la masse de l'électron et W_i, de façon générale, l'énergie nécessaire à l'ionisation de l'atome lorsque l'électron optique est sur le niveau d'excitation i.

b) Désexcitations par collisions. — Le nombre de désexcitations par centimètre cube et par seconde du niveau k au niveau j est de même :

$$N_{kj} = N_k \int_0^{\infty} Q_{kj}(v) \, v \, dN_e, \tag{4}$$

$$= N_k \, C'_{kj}.$$

Quand les conditions de l'équilibre thermodynamique sont réalisées, il y a microréversibilité des processus, d'où :

$$C'_{kj} = C'_{jk} \, (N_j/N_k)^*. \tag{5}$$

$(N_k/N_j)^*$ désigne le rapport des populations des niveaux k et j dans les conditions de l'équilibre thermodynamique. Si l'on suppose que la répartition des vitesses des particules est maxwellienne, la relation entre C'_{jk} et C'_{kj} reste valable en dehors des conditions de l'équilibre thermodynamique.

c) Ionisations par collisions. — Le nombre d'ionisations par centimètre cube et par seconde est donné par une expression analogue :

$$N_{je} = N_j \int_{v_{jk}}^{\infty} Q_{je}(v) \, v \, dN_e, \tag{6}$$

$$= N_j \, C'_j.$$

d) Recombinaisons. — Il s'agit ici d'un choc triple : l'énergie libérée par la capture d'un électron par l'ion est cédée à un électron libre.

$$N_{cj} = N_p \, C'_{cj}. \tag{7}$$

où N_p désigne la population des ions hydrogène. Dans les conditions de l'équilibre thermodynamique les coefficients C'_{jc} et C'_{cj} vérifient la relation :

$$C'_{cj} = C'_{jc}\,(N_j/N_p)\ ^*. \tag{8}$$

relation qui reste valable hors des conditions de l'équilibre thermodynamique si la répartition des vitesses des particules reste maxwellienne.

Considérons maintenant les processus radiatifs. En plus de l'examen du bilan des processus, nous donnerons les expressions des coefficients d'absorption et d'émission.

2) *Processus radiatifs.*

A) *Transitions entre niveaux discrets.* — Soient A_{kj} la probabilité de désexcitation d'Einstein de la transition jk, B_{jk} et B_{kj} les coefficients de Milne, j_ν, ψ_ν, φ_ν les profils normalisés de l'émission spontanée, de l'émission induite et de l'absorption.

$$\int_0^\infty j_\nu\,d\nu = 1, \quad \int_0^\infty \psi_\nu\,d\nu = 1, \quad \int_0^\infty \varphi_\nu\,d\nu = 1. \tag{9}$$

a) Émissions spontanées. — Le coefficient d'émission, c'est-à-dire l'énergie rayonnée par centimètre cube de matière, par unité de temps, dans un intervalle de fréquence égal à l'unité et par unité d'angle solide est, à la fréquence ν :

$$Es_\nu = N_k\,A_{kj}\,\frac{h\nu}{4\pi}\,j_\nu. \tag{10}$$

Le nombre total de désexcitations spontanées toujours par seconde et par centimètre cube est :

$$N_{kj} = N_k\,A_{kj}. \tag{11}$$

b) Émissions induites. — Le rayonnement d'intensité $I_\nu\,(\nu, \mu)$ de fréquence ν et d'orientation μ, provoque l'émission d'un rayonnement supposé de même direction.

Le coefficient d'émission induite est :

$$Ei_\nu = N_k\,B_{kj}\,\frac{h\nu}{4\pi}\,\psi_\nu. \tag{12}$$

Le nombre total de transitions induites est :

$$N_{kj} = N_k\,B_{kj}\int_0^\infty \left[\int_{4\pi} \frac{I_\nu\,(\nu, \mu)}{4\pi}\,d\omega\right]\psi_\nu\,d\nu, \tag{13}$$

$$= N_k\,B_{kj}\int_0^\infty J_\nu\,\psi_\nu\,d\nu,$$

où :

$$J_\nu = \int_{4\pi} I_\nu\,(\nu, \mu)\,\frac{d\omega}{4\pi}, \tag{14}$$

est l'intensité moyenne du rayonnement à la fréquence ν.

c) Excitations induites par le rayonnement.

Le coefficient d'absorption est :

$$K_\nu = N_j\,B_{jk}\,\frac{h\nu}{4\pi}\,\varphi_\nu, \tag{15}$$

et le coefficient d'absorption atomique k_ν :

$$k_\nu = B_{jk}\,\frac{h\nu}{4\pi}\,\varphi_\nu, \tag{16}$$

$$= k_0\,\varphi_\nu.$$

Le nombre total d'excitations provoquées par le rayonnement par centimètre cube et par seconde est :

$$N_{jk} = N_j\,B_{jk}\int_0^\infty \left[\int_{4\pi} I\,(\nu, \mu)\,d\omega/4\pi\right]\varphi_\nu\,d\nu, \tag{17}$$

$$= N_j\,B_{jk}\int_0^\infty J_\nu\,\varphi_\nu\,d\nu.$$

Il est commode, pour traiter l'équation de transfert du rayonnement, d'exprimer les coefficients d'émission en fonction du coefficient d'absorption atomique, $k_0\,\varphi_\nu$.

A l'équilibre thermodynamique l'intensité du rayonnement est égale à la fonction de Planck, les populations des niveaux vérifient la loi de Boltzmann-Saha, et il y a microréversibilité des processus radiatifs, d'où les relations :

$$A_{kj} = B_{kj}\,\frac{2h\nu^3}{c^2}, \tag{18}$$

$$g_j\,B_{jk} = g_k\,B_{kj}, \tag{19}$$

g_j et g_k désignant les poids statistiques des niveaux j et k. Ces relations restent valables hors des conditions de l'équilibre thermodynamique.

$$Es_\nu = N_k\,\frac{g_j}{g_k}\,\frac{2h\nu^3}{c^2}\,k_0\,j_\nu, \tag{20}$$

$$Ei_\nu = N_k\,\frac{g_j}{g_k}\,k_0\,\psi_\nu. \tag{21}$$

B) *Transitions liées-libres.* — Nous exprimerons les coefficients d'émission en fonction du coefficient d'absorption atomique k_ν. Considérons donc d'abord le cas de la photoionisation.

a) Photoionisations. — Le coefficient d'absorption est :

$$K_\nu = N_j\,k_\nu. \tag{22}$$

Posons :

$$\alpha_\nu = \frac{4\pi k_\nu}{h\nu}. \tag{23}$$

Le nombre total de photoionisations par centimètre cube et par seconde est :

$$N_{jc} = N_j \int_{\nu_j}^{\infty} \left(\int_{4\pi} I(\nu, \mu)\, d\omega/4\pi \right) \alpha_\nu\, d\nu, \tag{24}$$

$$= N_j \int^{\infty} J_\nu\, \alpha_\nu\, d\nu.$$

b) Recombinaisons spontanées et induites. — On peut considérer les recombinaisons radiatives comme dues à des chocs entre ions et électrons. La fréquence du rayonnement émis dépend de l'énergie cinétique de l'électron :

$$h\nu = \frac{1}{2} m v^2 + W_j. \tag{25}$$

Par analogie avec les transitions liées-liées, nous pouvons définir des probabilités de transition A_ν et B_ν telles que les coefficients d'émission soient :

$$Es_\nu = N_p\, A_\nu \frac{h\nu}{4\pi}, \quad Ei_\nu = N_p\, B_\nu \frac{h\nu}{4\pi} \tag{26}$$

Dans les conditions de l'équilibre thermodynamique, l'intensité du rayonnement est égale à la fonction de Planck, les populations vérifient la loi de Boltzmann-Saha, d'où les relations :

$$A_\nu = B_\nu \frac{2h\nu^3}{c^2}, \tag{27}$$

$$B_\nu = \alpha_\nu \exp(-h\nu/kT_e)\, (N_j/N_p)^*. \tag{28}$$

qui restent vérifiées hors des conditions de l'équilibre thermodynamique, si la répartition des vitesses des particules est maxwellienne.

Les coefficients d'émission sont donc :

$$Es_\nu = N_p \left[\frac{N_j}{N_p}\right]^* \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left[-\frac{h\nu}{kT_e}\right] k_\nu, \tag{29}$$

$$Ei_\nu = N_p \left[\frac{N_j}{N_p}\right]^* \exp\left|-\frac{h\nu}{kT_e}\right| k_\nu. \tag{30}$$

Le nombre total de recombinaisons radiatives spontanées par centimètre cube et par seconde est :

$$N_{cj} = N_p \left[\frac{N_j}{N_p}\right]^* \int_{\nu_j}^{\infty} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp\left[-\frac{h\nu}{kT_e}\right] \alpha_\nu\, d\nu. \tag{31}$$

De même le nombre total de recombinaisons induites est :

$$N_{cj} = N_p \left[\frac{N_j}{N_p}\right]^* \int_{\nu_j}^{\infty} J_\nu\, \alpha_\nu \exp\left[-\frac{h\nu}{kT_e}\right] d\nu. \tag{32}$$

Les populations des différents niveaux, indépendantes du temps doivent vérifier les équations de l'équilibre statistique.

L'équation du niveau j est :

$$\frac{dN_j}{dt} = 0, \tag{33}$$

soit :

$$\sum_{\substack{k \neq j \\ \text{col et rad}}} (N_{jk} - N_{kj}) + \sum_{\text{col et rad}} (N_{jc} - N_{cj}) = 0, \tag{34}$$

la sommation portant d'une part sur les niveaux, d'autre part sur les processus : collisionnels et radiatifs.

Nous prendrons comme inconnues des équations de l'équilibre statistique les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique.

3) *Coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local.*

Dans les conditions de l'équilibre thermodynamique la loi de Boltzmann-Saha donne le rapport de la population du niveau j à celles des ions et des électrons.

$$\frac{N_j}{N_p\, N_e} = \frac{g_j}{u_{II}} \frac{h^3}{2(2\pi m k T_e)^{3/2}} \exp(W_j/kT_e). \tag{35}$$

En dehors des conditions de l'équilibre thermodynamique on introduit un coefficient d'écart à l'équilibre thermodynamique b_j (Menzel, 1937, Thomas, 1957).

$$\frac{N_j}{N_p\, N_e} = b_j \frac{g_j}{u_{II}} \frac{h^3}{2(2\pi m k T_e)^{3/2}} \exp(W_j/kT_e), \tag{36}$$

$$= b_j \left[\frac{N_j}{N_p\, N_e}\right]^*.$$

$(N_j/N_p\, N_e)^*$ désigne la valeur du rapport de la population du niveau j au produit des populations des ions et des électrons dans les conditions de l'équilibre thermodynamique à une température égale à la température électronique locale T_e.

Dans le premier membre N_j, N_p et N_e désignent les populations effectives, hors des conditions de l'équilibre thermodynamique.

Nous verrons que les équations de l'équilibre statistique donnent un système non homogène dont les inconnues sont les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique. L'intervalle de variation des coefficients b_j avec j est souvent plus petit que l'intervalle de variation des populations N_j : il s'en suit que la résolution numérique du système obtenu présente souvent moins de difficultés.

Remarquons que l'écriture du système d'équations de l'équilibre statistique, par l'intermédiaire des termes de collision, exige la connaissance de la densité électronique N_e, qui dépend en fait de l'ionisation de l'hydrogène.

Explicitons maintenant les équations d'équilibre statistique ;

4) *Équations de l'équilibre statistique.*

L'équation de rang j exprimant le bilan par centimètre cube et par seconde des processus faisant intervenir le niveau j est multipliée par :

$$B_j = b_j \frac{g_j}{N_j} \exp(W_j/kT_e), \tag{37}$$

afin d'introduire comme inconnues les coefficients d'écart à l'E. T. L. et d'éliminer les facteurs de Boltzmann qui interviennent dans les termes concernant une même transition. (Pottasch et Thomas, 1959).

Considérons par exemple les termes de collision $N_j C'_{jk}$ et $N_k C'_{kj}$ de la transition jk ($j < k$).

L'équation (5) permet d'exprimer C'_{kj} en fonction de C'_{jk} :

$$C'_{kj} = \left(\frac{N_j}{N_k}\right)^* C'_{jk}.$$

Le rapport $N_j/N_k)^*$ est donné par la loi de Boltzmann :

$$\left(\frac{N_j}{N_k}\right)^* = g_j \exp(W_j/kT_k)/g_k \exp(W_k/kT_e). \tag{38}$$

Dans l'équation de rang j les termes de collision de la transition jk deviennent après multiplication par B_j :

$$N_j B_j C'_{jk} = N_j \frac{b_j}{N_j} g_j \exp(W_j/kT_e) C'_{jk}, \tag{39}$$

$$= b_j g_j \exp(W_j/kT_e) C'_{jk}.$$

et :

$$N_k B_j C'_{kj} = N_k \frac{b_j}{N_j} g_j \exp(W_j/kT_e) \left(\frac{N_j}{N_k}\right)^* C'_{jk}. \tag{40}$$

$$= b_k g_j \exp(W_j/kT_e) C'_{jk}.$$

puisque :

$$\frac{N_k}{N_j} = \frac{b_k}{b_j} \left(\frac{N_j}{N_k}\right)^*. \tag{41}$$

Dans l'équation de rang k les mêmes termes de collision deviennent après multiplication par B_k :

$$N_j B_k C'_{jk} = N_j \frac{b_k}{N_k} g_k \tag{42}$$

$$= b_j g_j \exp(W_j/kT_e) C'_{jk},$$

et :

$$N_k B_k C'_{kj} = N_k \frac{b_k}{N_k} g_k \exp(W_k/kT_e) \left(\frac{N_j}{N_k}\right)^* C'_{jk}, \tag{43}$$

$$= b_k g_j \exp(W_j/kT_e) C'_{jk}.$$

Nous poserons :

$$C_{jk} = C'_{jk} g_j \exp(W_j/kT_e), \tag{44}$$

et pour les transitions liées-libres :

$$C_j = C'_j g_j \exp(W_j/kT_e). \tag{45}$$

Nous ne distinguerons plus par la suite les termes C_{jk} et C_{jk} qui sont égaux.

Les termes de photoexcitation P_{jk}, de désexcitation spontanée R_{kj} et de désexcitation induite R_{kj} de la transition liée-liée jk sont respectivement définis par :

$$P_{jk} = \left[\frac{c^2}{2h\nu^3} \int^{\infty} J_\nu \varphi_\nu \, d\nu\right] A_{kj} g_k \exp(W_j/kT_e), \tag{46}$$

$$Rs_{kj} = A_{kj} g_k \exp(W_k/kT_e), \tag{47}$$

$$Ri_{kj} = \left[\frac{c^2}{2h\nu^3} \int_0^{\infty} J_\nu \psi_\nu \, d\nu\right] A_{kj} g_k \exp(W_k/kT_e) \tag{48}$$

Dans le cas des transitions liées-libres les termes correspondants sont :

$$P_j = \left[\int_{\nu_j}^{\infty} J_\nu \alpha_\nu \, d\nu\right] g_j \exp(W_j/kT_e), \tag{49}$$

$$Rs_j = \left[\int_{\nu_j}^{\infty} \alpha_\nu \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \, d\nu\right] \tag{50}$$

$$g_j \exp W_j/kT_e),$$

$$Ri_j = \left[\int_{\nu_j}^{\infty} \alpha_\nu J_\nu \exp(-h\nu/kT_e) \, d\nu\right] \tag{51}$$

$$g_j \exp(W_j/kT_e),$$

On posera :

$$R_j = Rs_j + Ri_j, \tag{52}$$

$$R_{kj} = Rs_{kj} + Ri_{kj}. \tag{53}$$

L'équation d'équilibre statistique du niveau j est :

$$(54) \quad -\sum_i b_i (C_{ij} + P_{ij}) + b_j (C_j + P_j + \sum_i C_{ij} + \sum_k C_{jk} + \sum_i R_{ji} + \sum_k P_{jk}) - \sum_k b_k (C_{jk} + R_{jk}) = C_j + R_j,$$

avec :

$$i < j < k.$$

Nous ferons quelques remarques sur les équations d'équilibre statistique.

a) Dans l'équation du niveau j nous avons compté positivement les processus qui dépeuplent le niveau j, les termes diagonaux de la matrice sont donc positifs, et négativement les processus qui peuplent le niveau j, d'où le signe négatif des termes non diagonaux de la matrice.

b) Tous les termes qui dénombrent les processus qui dépeuplent le niveau j, donc qui sont coefficients de N_j ou, après modification des équations, de b_j, sont dans la colonne j.

c) Il s'en suit donc que les termes de photoexcitation et le terme de photoionisation du niveau j ne figurent que dans la colonne j :

— l'élément de la matrice de la ligne j comprend la somme :

$$P_j + \sum_k P_{jk} \quad (k > j),$$

— l'élément de la ligne k $(k > j)$ comprend le terme :

$$-P_{jk} \quad (k > j).$$

d) De même les termes de désexcitation du niveau k, termes qui sont facteurs de N_k ou b_k sont situés dans la colonne k :

— le terme R_{kj} $(j > k)$ figure dans l'élément de la matrice de la ligne k et de la colonne k, précédé du signe + ;

— l'élément de la ligne j comporte le terme $(-R_{kj})$.

La résolution des équations de l'équilibre statistique donne les valeurs des coefficients b_j qui permettent de calculer les populations, calcul que nous préciserons au cours des applications ; mais les coefficients des équations de l'équilibre statistique dépendent des termes de photoionisation et de photoexcitation.

Nous devons donc résoudre les équations de transfert du rayonnement pour les différentes transitions radiatives de l'atome, afin de déterminer la valeur de ces termes.

II. Équations de transfert du rayonnement : leur linéarisation.

Soit donc une transition liée-liée ou liée-libre dont les coefficients d'absorption et d'émission à une certaine fréquence ν sont K_ν, Es_ν, Ei_ν. Nous devons tenir compte également des autres absorbants intervenant à cette même fréquence, absorbants continus dont les coefficients d'absorption et d'émission sont : K_c, Es_c, Ei_c, et le cas échéant, de la diffusion électronique, que nous supposerons, à tort, mais comme dans les travaux classiques, isotrope.

L'équation de transfert de l'intensité I, à la fréquence ν, suivant l'orientation définie par μ, à la profondeur géométrique h, est :

$$(55) \quad \mu \frac{dI}{dh} = -[K_\nu + K_c + \sigma - (Ei_\nu + Ei_c)] I + Es_\nu + Es_c + \sigma J.$$

La fonction source, rapport du coefficient d'émission au coefficient d'absorption corrigé de l'émission induite est :

$$(56) \quad S = \frac{Es_\nu + Es_c + \sigma J_\nu}{K_\nu + K_c + \sigma - (Ei_\nu + Ei_c)}.$$

Les différents coefficients d'absorption et d'émission qui figurent dans l'équation de transfert dépendent des populations, qui peuvent être calculées à partir des coefficients des équations de l'équilibre statistique, coefficients qui dépendent, nous l'avons vu, des champs de rayonnement des différentes transitions de l'atome. Nous devons donc résoudre simultanément les équations d'équilibre statistique et les équations de transfert du rayonnement.

Pour cela il suffit de substituer aux populations figurant dans les coefficients d'absorption et d'émission leurs expressions, obtenues à partir des coefficients des équations d'équilibre statistique, expressions qui dépendent des intensités du rayonnement des transitions de l'atome. Il faudrait ensuite résoudre le système d'équations différentielles obtenu pour les intensités, en considérant donc l'ensemble des transitions de l'atome. Ce système d'équations serait d'ordre élevé, très compliqué, non linéaire par rapport aux intensités.

Il est possible de linéariser l'expression de la fonction source et donc le système d'équations différentielles par rapport aux intensités pour un ensemble de transitions de même niveau inférieur. La linéarisation ne porte que sur les fonctions sources des transitions. Si l'on suppose connues les

profondeurs optiques des transitions ainsi que l'absorption et l'émission continues, il est alors possible d'intégrer ce système d'équations différentielles par la méthode qui sera indiquée au chapitre suivant. Pour résoudre complètement le problème posé on emploie un procédé itératif.

Nous définirons d'abord la fonction source d'une transition.

1) *Fonction source d'une transition. Définition.*

Selon la définition donnée par THOMAS (1957) la fonction source d'une transition est égale au rapport du coefficient d'émission au coefficient d'absorption corrigé de l'émission induite.

$$(57) \qquad S_\nu = E s_\nu [K_\nu - E i_\nu]^{-1}, \\ = \frac{E s_\nu}{E i_\nu}\left[\frac{K_\nu}{E i_\nu} - 1\right]^{-1},$$

soit dans le cas d'une transition liée-liée :

$$(58) \quad S_{jk\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu}\left[\frac{g_k}{g_j}\frac{N_k}{N_j} - \frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}\right]^{-1} \\ = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu}\left[\frac{b_j}{b_k}\exp(h\nu/kT_e) - \frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}\right]^{-1},$$

et, dans le cas d'une transition liée-libre :

$$(59) \quad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\frac{N_j}{N_p}\left[\frac{N_p}{N_j}\right]^* \exp(h\nu/kT_e) - 1\right]^{-1}, \\ = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\frac{1}{b_j}\exp(h\nu/kT_e) - 1\right]^{-1}.$$

Sur la largeur, qui est très étroite, du profil d'absorption ou d'émission d'une transition liée-liée, on peut considérer que la fréquence ν est constante. De plus, on peut admettre que le profil d'émission induite ψ_ν est identique au profil d'absorption φ_ν :

$$(60) \qquad \psi_\nu/\varphi_\nu = 1.$$

De toute façon le terme ψ_ν/φ_ν provient de l'expression de l'émission induite et peut donc être considéré comme un terme correctif tout au moins pour les transitions entre les niveaux inférieurs de l'atome.

La variation de la fonction source sur la largeur du profil provient donc du terme j_ν/φ_ν.

Si la diffusion est complètement incohérente :

$$(61) \qquad j_\nu = \varphi_\nu.$$

La fonction source S_{jk} est alors indépendante de la fréquence :

$$(62) \quad S_{jk} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[\frac{b_j}{b_k}\exp(h\nu/kT_e) - 1\right]^{-1}.$$

Au cours de l'étude des applications concernant l'astrophysique nous reviendrons sur l'hypothèse de la diffusion complètement incohérente.

La fonction source d'une transition liée-libre, qui correspond à un spectre continu de fréquences, est évidemment variable avec la fréquence.

Nous utiliserons souvent pour les fonctions sources les expressions :

$$(63) \quad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{b_j}\exp(-h\nu/kT_e) \\ \left[1 - \frac{1}{b_j}\exp(-h\nu/kT_e)\right]^{-1},$$

$$(64) \quad S_{jk\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu}\frac{b_k}{b_j}\exp(-h\nu/kT_e) \\ \left[1 - \frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}\frac{b_k}{b_j}\exp(-h\nu/kT_e)\right]^{-1}.$$

où les termes entre crochets sont des termes correctifs dus à l'émission induite.

Nous devons substituer, maintenant, à b_j et b_j/b_k leurs expressions obtenues à partir des coefficients des équations d'équilibre statistique.

2) *Fonction source des transitions liées-liées.*

Désignons par A le déterminant de la matrice des équations d'équilibre statistique, par A_j le déterminant obtenu à partir de A en substituant à la colonne j les seconds membres des équations d'équilibre statistique :

$$(65) \qquad \frac{b_k}{b_j} = \frac{A_k}{A_j}.$$

Les termes d'excitation par le rayonnement et le terme de photoionisation du niveau j sont dans la colonne j de A. A_j est donc indépendant de ces termes et A_k en dépend linéairement.

$$(66) \qquad A_k = \sum_{k'=j+1}^{\infty} a_{jk'} P_{jk'} + a_{jc} P_j + a_j.$$

A_j par contre dépend linéairement des termes de désexcitation radiatifs du niveau k :

$$(67) \qquad A_j = \sum_{i=1}^{k-1} a'_{ki} R_{ki} + a'_k.$$

Les coefficients a_{jk} et a'_{jk} sont égaux. En effet échangeons les colonnes j et k de A_j en changeant de plus les signes des éléments de la colonne j. A_k et A_j ne diffèrent que par la colonne j. Les mineurs des termes de la colonne j sont égaux. Dans le déterminant A_k, P_{jk} figure dans la ligne j précédé du signe + et dans la ligne k précédé du signe —, dans le

déterminant A_j, R_{kj} figure dans les mêmes lignes précédé des mêmes signes.

$$(68)\quad \frac{b_k}{b_j} = \frac{P_{jk} + \sum_{k'} d_{jk'} P_{jk'} + d_{jc} P_j + d_j}{R_{kj} + \sum_i d_{ki} R_{kj} + d'_k},$$

$$\begin{cases} k' > j, \\ k' \neq k, \end{cases} \qquad \begin{cases} i < k, \\ i \neq j. \end{cases}$$

Les coefficients $d_{jk'}$, d_{jc}, $d_{j'}$, d_{ki}, et d'_k dépendent des termes $R_{k'j}$ et du terme de recombinaison R_j.

Posons :

$$(69)\quad \frac{b_k}{b_j} = \frac{P_{jk} + N'}{R_{kj} + D'},$$

où N′ est une fonction linéaire des termes de rayonnement $P_{jk'}$ des transitions de niveau inférieur j, et où D′ est indépendant de ces mêmes termes.

En tenant compte des expressions de P_{jk} (46) et R_{kj} (53) on obtient :

$$(70)\quad \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{b_k}{b_j}\exp(-h\nu/kT_e) = \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu d\nu + N}{1 + D'' + \frac{c^2}{2h\nu^3}\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu d\nu},$$

où le terme :

$$(71)\quad \frac{c^2}{2h\nu^3}\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu d\nu = \frac{Ri_{kj}}{Rs_{kj}},$$

rapport des désexcitations induites et des désexcitations spontanées, est petit par rapport à l'unité, tout au moins pour les transitions entre les niveaux inférieurs de l'atome.

Les quantités N et D″ sont liées aux quantités N′ et D′ par les équations :

$$(72)\quad \begin{cases} N = N' \Big/ \left(\frac{c^2}{2h\nu^3} A_{kj}\, g_k \exp(W_j/kT_e)\right), \\ D'' = D/(A_{kj}\, g_k \exp(W_k/kT_e)). \end{cases}$$

D'après l'équation (64) la fonction source de la transition jk est égale à :

$$(73)\quad S_{jk\nu} = \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu d\nu + N}{1 + D'' + \frac{c^2}{2h\nu^3}\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu d\nu - \frac{c^2}{2h\nu^3}\left(\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu d\nu + N\right)\frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}} \frac{j_\nu}{\varphi_\nu},$$

$$N = \sum_{k'} L_{jkk'} P_{jk'} + L_{jc} P_j + L_{jk} \quad (k' \neq k).$$

Le numérateur de la fonction source est une fonction linéaire des termes de photoexcitation du niveau j. En réalité la fonction source n'est pas strictement une fonction linéaire des intensités du rayonnement excitant le niveau j.

En effet nous avons vu (68) que les coefficients $id_{jk'}$, d_{jc} et d_j dépendent des termes de désexcitation nduite $Ri_{k'j}$ et du terme de recombinaison induite Ri_j. Il en est de même des coefficients $L_{jkk'}$ L_{jc} et L_{jk} qui leur sont proportionnels. Mais les termes de désexcitation induite et le terme de recombinaison induite sont toujours associés aux termes de désexcitation spontanée (53) et de recombinaison spontanée (46) auxquels ils sont en général très inférieurs.

Examinons maintenant le dénominateur de la fonction source.

Comme les divers paramètres du numérateur, D″ dépend des termes de désexcitation induite et du terme de recombinaison induite.

Nous avons signalé que le terme :

$$\frac{c^2}{2h\nu^3}\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu d\nu,$$

était petit par rapport à l'unité.

Quant au terme :

$$\frac{c^2}{2h\nu^3}\left(\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu d\nu + N\right)\frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu},$$

d'après l'équation (64) il provient de l'expression du rapport de l'émission induite à l'absorption et il peut donc être également considéré comme petit par rapport à l'unité.

En réalité les termes de rayonnement qui figurent au dénominateur de la fonction source doivent être comparés non à l'ensemble du dénominateur, qui est voisin de l'unité pour les raies de résonance, mais à D″ : ils lui sont effectivement inférieurs dans le cas des transitions entre les niveaux inférieurs de l'atome aux températures suffisamment basses. Nous les calculerons avec des valeurs approchées des intensités, pratiquement les valeurs obte-

nues au cours de l'itération précédente. Lorsque la convergence est atteinte ces valeurs coïncident avec les valeurs exactes des intensités.

Si l'on admet que le profil d'émission induite est égal au profil d'absorption :

$$\psi_\nu = \varphi_\nu,$$

$$(74) \qquad S_{jk\nu} = \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu + N}{1 + D'' - \frac{c^2}{2h\nu^3} N} \frac{j_\nu}{\varphi_\nu},$$

$$= \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu + N}{1 + D} \frac{j_\nu}{\varphi_\nu},$$

où

$$(75) \qquad D = D'' - \frac{c^2}{2h\nu^3} N.$$

La fonction source S_{jk} est alors strictement une fonction linéaire des intensités du rayonnement qui excitent la transition jk.

Si la diffusion est complètement incohérente la fonction source est alors indépendante de la fréquence :

$$(76) \qquad S_{jk} = \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu + N}{1 + D}.$$

3) *Fonction source des transitions liées-libres.*

L'étude faite au paragraphe précédent montre que $1/b_j$ est une fonction linéaire des termes d'excitation et du terme de photoionisation du niveau j.

$$(77) \qquad \frac{1}{b_j} = \frac{A}{A_j} = \frac{P_j + N'}{R_j + D'}.$$

$$N' = \sum_{k'=j+1}^{\infty} L_{jck'} P_{jk'} + L_{jc}.$$

L'expression de la fonction source est analogue à celle obtenue pour les transitions liées-liées :

$$(78) \quad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \frac{P_j + N'}{R_j + D' - (P_j + N') \exp(-h\nu/kT_e)}.$$

Les termes de photoionisation et de recombinaison induite, contrairement à ce qui se produit dans le cas des transitions discrètes ne s'éliminent pas au dénominateur. Cela provient du fait que l'intervalle d'absorption, en fréquence, est étendu.

On peut donner à S_j une forme analogue à S_{jk} en divisant le numérateur et le dénominateur par le terme de recombinaison spontanée :

$$(79) \qquad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \frac{\frac{P_j}{Rs_j} + N}{1 + D + \frac{Ri_j}{Rs_j} \frac{P_j + N'}{Rs_j \exp(h\nu/kT_e)}},$$

$$N = N'/Rs_j.$$

$$D = \frac{D'}{Rs_j}.$$

Nous préciserons au cours des applications la signification physique des paramètres N et D des fonctions source.

4) *Équations de transfert.*

Posons :

$$(80) \qquad \begin{aligned} \varkappa_\nu &= K_\nu - E i_\nu, \\ \varkappa_c &= K_c - E i_c, \\ S_\nu &= E s_\nu / \varkappa_\nu. \end{aligned}$$

L'équation de transfert s'écrit :

$$(81) \quad \mu \frac{dI}{dh} = -[\varkappa_\nu + \varkappa_c + \sigma] \left[I_\nu - \frac{S_\nu + (E s_c + \sigma J)/\varkappa_\nu}{(\varkappa_\nu + \varkappa_c + \sigma)/\varkappa_\nu} \right].$$

où S_ν est de la forme $S_{j\nu}$ ou $S_{jk\nu}$ suivant que l'on considère une fréquence d'une transition liée-libre ou liée-liée.

Pour une transition donnée les termes $\varkappa_\nu$, $\varkappa_c$ et Es_c dépendent des populations donc en fait des intensités du rayonnement des différentes transitions de l'atome. Si l'on suppose connues des valeurs approchées des intensités, il est possible de résoudre les équations de l'équilibre statistique et de calculer $\varkappa_\nu$, $\varkappa_c$ et Es_c. Si l'on utilise également ces valeurs approchées pour calculer à chaque profondeur $D(h)$ et les différents coefficients de $N(h)$, alors on obtient un système d'équations différentielles linéaires couplées qu'il est possible de résoudre.

Si l'ensemble P des termes de photoexcitation et du terme de photoionisation figurant dans S_ν est calculé à l'aide de formules de quadratures comprenant N_1 fréquences et N_2 directions, le système d'équations est d'ordre $2\,N_1\,N_2$:

$$(82) \qquad P = \sum_{i=1}^{N_1} a_i \sum_{j=1}^{N_2} b_i \left[I_{ij}(\nu_i, -\mu_j) + I_{ij}(\nu_i, \mu_j) \right].$$

On a vu dans ce chapitre qu'en tenant compte des équations d'équilibre statistique, on obtient pour la fonction source une expression qui dépend linéairement des intensités du rayonnement, si l'on ne considère que des transitions de même niveau inférieur. A cause de l'émission induite la fonction source n'est d'ailleurs pas strictement une fonction linéaire des intensités du rayonnement qui excite et ionise le niveau inférieur.

On obtient donc pour des transitions de même niveau inférieur un système d'équations différentielles partiellement linéarisées par rapport aux intensités ; pour résoudre complètement le problème posé on emploie un procédé itératif. Tous les paramètres qui dépendent des intensités :

— les paramètres de la fonction source,
— l'absorption dans la transition,
— l'absorption et l'émission continues,

sont calculés à l'aide d'une approximation connue pour les intensités ; pratiquement cette approximation est constituée par les intensités obtenues au cours de l'itération précédente. Il est alors possible d'intégrer le système d'équations différentielles linéarisées par la méthode qui sera étudiée au chapitre suivant. Nous décrivons plus loin les procédés itératifs et la méthode utilisée pour déterminer les valeurs numériques des divers paramètres des équations de transfert.

III. Méthode d'intégration numérique des équations de transfert du rayonnement.

Si l'on introduit la profondeur optique τ définie par :

$$d\tau = -(\varkappa_\nu + \varkappa_c)\, dh, \tag{83}$$

chacune des équations du système est de la forme :

$$\mu \frac{dI}{d\tau} = I - S. \tag{84}$$

1) *Conditions initiales.*

Les conditions initiales sont, pour les intensités se propageant vers l'intérieur :

$$I(\nu, -\mu, h) = 0 \quad \text{pour} \quad h = 0. \tag{85}$$

Nous supposons connues à l'infini les valeurs des intensités se propageant vers la surface.

A une profondeur suffisamment grande les conditions de l'équilibre thermodynamique local sont réalisées et il y a microréversibilité des processus radiatifs. On peut donc supposer que toutes les intensités sont égales à la fonction de Planck.

$$S = B, \tag{86}$$
$$I = S.$$

On limite l'intervalle d'intégration à la profondeur H où ces conditions sont réalisées. Nous verrons par la suite qu'il est possible de limiter l'intervalle d'intégration à la profondeur où la microréversibilité est réalisée pour la transition considérée, sans que l'équilibre thermodynamique local le soit.

2) P. Feautrier (1964) a adapté aux équations de transfert du rayonnement la méthode de Fox (1957), méthode qui s'applique aux systèmes d'équations différentielles dont les équations, pour chaque valeur de la variable, peuvent être exprimées par des équations aux différences d'ordre deux et pour lesquels les valeurs initiales sont données en deux points de l'intervalle d'intégration.

P. Feautrier utilise comme fonction l'intensité moyenne sur une direction :

$$y(\mu) = [I(+\mu) + I(-\mu)]/2. \tag{87}$$

Établissons l'équation différentielle pour la fonction y. Posons :

$$f(\mu) = [I(+\mu) - I(-\mu)]/2. \tag{88}$$

Les équations de transfert suivant la direction définie par μ sont :

$$\mu \frac{dI(+\mu)}{d\tau} = I(+\mu) - S, \tag{89}$$

$$\mu \frac{dI(-\mu)}{d\tau} = -I(-\mu) + S,$$

d'où :

$$\begin{cases} \mu \dfrac{dy}{d\tau} = f, \\ \mu \dfrac{df}{d\tau} = y - S, \end{cases} \tag{90}$$

$$\mu^2 \frac{d^2 y}{d\tau^2} = y - S. \tag{91}$$

La condition à l'origine, c'est-à-dire pour τ nul :

$$I(-\mu) = 0,$$

est équivalente à :

$$y = f,$$

soit :

$$\mu \frac{dy}{d\tau} = y. \tag{92}$$

La condition à la profondeur limite H devient :

(93) $$y = B.$$

Si l'ensemble P (82) des termes de photoexcitation et du terme de photoionisation figurant dans la fonction source est calculé à l'aide de formules de quadrature comprenant N_1 fréquences et N_2 directions on obtient un système d'équations différentielles d'ordre $N_1 N_2$.

Les intensités moyennes, y, peuvent être considérées comme les composantes du vecteur $\mathbf{Y}$ pour lequel l'équation de transfert et les conditions aux limites sont obtenues à partir des équations (91) (92) et (93).

L'équation différentielle du vecteur $\mathbf{Y}$ est une équation différentielle matricielle du deuxième ordre qui peut être à chaque profondeur remplacée par une équation aux différences d'ordre deux. On obtient ainsi un système d'équations auquel la méthode de Fox est applicable.

Le choix de la fonction fait par Feautrier présente le grand avantage de réduire l'ordre du système par un facteur deux.

3) *Méthode d'intégration numérique de* Fox.

L'intervalle d'intégration H est partagé en M intervalles.

A la profondeur d'indice i l'équation différentielle du vecteur $\mathbf{Y}$ donne la relation matricielle :

(94) $$-\mathbf{a}_i \mathbf{Y}_{i-1} + \mathbf{R}_i \mathbf{Y}_i - \mathbf{c}_i \mathbf{Y}_{i+1} = \mathbf{d}_i.$$

Nous donnerons plus loin l'expression des différentes matrices.

En tenant compte des conditions aux limites on obtient le système d'équations :

(95)

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}_1\ \mathbf{Y}_1 \quad - \mathbf{c}_1\ \mathbf{Y}_2 \quad &= \mathbf{d}_1,\\
-\mathbf{a}_2\ \mathbf{Y}_1 \quad + \mathbf{R}_2\ \mathbf{Y}_2 \quad - \mathbf{c}_2\ \mathbf{Y}_3 &= \mathbf{d}_2,\\
- \mathbf{a}_3\ \mathbf{Y}_2 \quad + \mathbf{R}_3\ \mathbf{Y}_3 - \mathbf{c}_3\ \mathbf{Y}_4 \quad &= \mathbf{d}_3,\\
- \mathbf{a}_i\ \mathbf{Y}_{i-1} + \mathbf{R}_i\ \mathbf{Y}_i - \mathbf{c}_i\ \mathbf{Y}_{i+1} &= \mathbf{d}_i,\\
-\mathbf{a}_{M-1}\ \mathbf{Y}_{M-2} + \mathbf{R}_{M-1}\ \mathbf{Y}_{M-1} - \mathbf{c}_{M-1}\ \mathbf{Y}_M &= \mathbf{d}_{M-1},\\
- \mathbf{a}_M\ \mathbf{Y}_{M-1} + \mathbf{R}_M\ \mathbf{Y}_M - \mathbf{c}_M\ \mathbf{Y}_{M+1} &= \mathbf{d}_M,\\
- \mathbf{a}_{M+1}\ \mathbf{Y}_M + \mathbf{R}_M\ \mathbf{Y}_{M+1} &= \mathbf{d}_{M+1},
\end{aligned}$$

que l'on résout par la méthode d'élimination de Gauss.

On part de la première ou de la dernière équation et, par éliminations successives, on réduit chacune des équations à une équation aux différences d'ordre 1. Si l'on part de la première équation, on effectue les calculs suivants :

(96) $$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{R}_1^{-1} (\mathbf{c}_1 \mathbf{Y}_2 + \mathbf{d}_1),$$

soit :

(97) $$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{s}_1 \mathbf{Y}_2 + \mathbf{e}_1,$$

ce qui nécessite l'inversion de la matrice $\mathbf{R}_1$.

Ensuite :

$$-\mathbf{a}_2 (\mathbf{s}_1 \mathbf{Y}_2 + \mathbf{e}_1) + \mathbf{R}_2 \mathbf{Y}_2 - \mathbf{c}_2 \mathbf{Y}_3 = \mathbf{d}_2,$$

$$(-\mathbf{a}_2 \mathbf{s}_1 + \mathbf{R}_2) \mathbf{Y}_2 - \mathbf{c}_2 \mathbf{Y}_3 = \mathbf{d}_2 + \mathbf{a}_2 \mathbf{e}_1,$$

soit :

(98) $$\mathbf{Y}_2 = \mathbf{s}_2 \mathbf{Y}_3 + \mathbf{e}_2,$$

avec :

(99) $$\mathbf{s}_2 = (-\mathbf{a}_2 \mathbf{s}_1 + \mathbf{R}_2)^{-1} \mathbf{c}_2,$$

(100) $$\mathbf{e}_2 = (-\mathbf{a}_2 \mathbf{s}_1 + \mathbf{R}_2)^{-1} (\mathbf{d}_2 + \mathbf{a}_2 \mathbf{e}_1),$$

calcul qui exige l'inversion de la matrice :

$$-\mathbf{a}_2 \mathbf{s}_1 + \mathbf{R}_2.$$

Les relations de récurrence sont les suivantes :

(101) $$\mathbf{s}_i = (-\mathbf{a}_i \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{R}_i)^{-1} \mathbf{c}_i,$$

(102) $$\mathbf{e}_i = (-\mathbf{a}_i \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{R}_i)^{-1} (\mathbf{d}_i + \mathbf{a}_i \mathbf{e}_{i-1}),$$

(103) $$\mathbf{Y}_i = \mathbf{s}_i \mathbf{Y}_{i+1} + \mathbf{e}_i.$$

La dernière équation donne un système d'équations linéaires dont les inconnues sont les composantes du vecteur $\mathbf{Y}_{M+1}$:

(104) $$\mathbf{Y}_M = \mathbf{s}_M \mathbf{Y}_{M+1} + \mathbf{e}_M,$$

$$(-\mathbf{a}_{M+1} \mathbf{s}_M + \mathbf{R}_{M+1}) \mathbf{Y}_{M+1} = \mathbf{d}_{M+1} - \mathbf{a}_{M+1} \mathbf{e}_M.$$

Connaissant la valeur numérique du vecteur $\mathbf{Y}_{M+1}$ on utilise les équations aux différences d'ordre 1 (103) pour calculer le vecteur $\mathbf{Y}$ de la profondeur M à l'origine. Le temps de calcul est évidemment celui de l'inversion des matrices et dépend de leurs dimensions.

4) *Difficultés numériques.*

a) Nous allons signaler les difficultés numériques rencontrées en prenant comme exemple le transfert du rayonnement d'une transition liée-liée dans le cas de la diffusion complètement incohérente.

Nous donnerons d'abord l'expression des différentes matrices. Nous prendrons comme variable de profondeur, la profondeur optique au centre de la raie, variable qui a un sens physique, et nous utiliserons des notations plus condensées, voisines de celles, classiques, de Jefferies et Thomas.

$\varkappa_0$ (cm^{-1}) désigne le coefficient d'absorption au centre de la raie corrigée de l'émission induite.

$$\text{(105)}\quad \begin{aligned} \varkappa_\nu &= \varkappa_0\,\Phi_\nu, \qquad (\Phi_\nu = 1 \text{ au centre de la raie}),\\ d\tau_c &= -\varkappa_c\,dh,\\ d\tau_0 &= -\varkappa_0\,dh,\\ r &= d\tau_c/d\tau_0,\\ d\tau &= (r+\Phi)\,d\tau_0,\\ S_c &= E s_c/\varkappa_c. \end{aligned}$$

Nous introduirons la profondeur optique T suivant la direction μ :

$$\text{(106)}\qquad dT = d\tau/\mu.$$

L'équation différentielle de la composante y_k du vecteur **Y** est :

$$\text{(107)}\quad \frac{d^2 y_k}{dT_k^2} = y_k - \frac{1}{1+\dfrac{r}{\Phi_k}}\left[\frac{\sum_{j=1}^{N_1 N_2}\alpha_j y_j + N}{1+D} + \frac{r}{\Phi_k} S_\nu\right].$$

Pour ne pas multiplier les indices, nous désignerons par Φ_k (105) le profil d'absorption de la composante k ; en réalité chaque composante correspond à une valeur de l'indice de fréquence, indice variant de 1 à N_1, et à une valeur de l'indice de direction, indice variant de 1 à N_2, et pourrait donc être désignée par un ensemble de deux indices. A une profondeur donnée le premier indice est l'indice de la composante ; le second indice sera celui de la profondeur.

Nous calculerons la dérivée seconde, à la profondeur d'indice i, à l'aide de l'expression :

$$\text{(108)}\quad \frac{d^2 y_{k,i}}{dT_{k,i}^2} = \frac{\dfrac{y_{k,i+1}-y_{k,i}}{T_{k,i+1}-T_{k,i}} - \dfrac{y_{k,i}-y_{k,i-1}}{T_{k,i}-T_{k,i-1}}}{(T_{k,i+1}-T_{k,i-1})/2}$$

qui est de la forme :

$$-(-a_{k,i}\,y_{k,i-1} + (a_{k,i}+c_{k,i})\,y_{k,i} - c_{k,i}\,y_{k,i+1})/\gamma_{k,i},$$

où

$$\text{(109)}\quad \begin{cases} a_{k,i} = 1/(T_{k,i}-T_{k,i-1}),\\ c_{k,i} = 1/(T_{k,i+1}-T_{k,i}),\\ \gamma_{k,i} = (T_{k,i+1}-T_{k,i-1})/2. \end{cases}$$

Nous multiplierons, pour des raisons de précision de calcul l'équation k, à la profondeur i, par le facteur $\gamma_{k,i}$.

A la profondeur d'indice i l'équation (107) donne donc l'équation aux différences d'ordre deux :

$$\text{(110)}\quad \begin{aligned} &-a_{k,i}\,y_{k,i-1} + (a_{k,i}+c_{k,i}+\gamma_{k,i})\,y_{k,i}\\ &-\frac{1}{1+D_i}\gamma_{k,i}\frac{1}{1+\dfrac{r_i}{\Phi_{k,i}}}\left(\sum_{j=1}^{N_1 N_2}\alpha_{j,i}\,y_{j,i}\right) - c_{k,i}\,y_{k,i+1}\\ &\qquad = \frac{N_i}{1+D_i}\gamma_{k,i}\frac{1}{1+\dfrac{r_i}{\Phi_{k,i}}} + Sc_i\,\gamma_{k,i}\frac{r_i}{\Phi_{k,i}+r_i}. \end{aligned}$$

Nous poserons :

$$\text{(111)}\qquad l_{k,i} = \frac{1}{1+\dfrac{r_i}{\Phi_{k,i}}},$$

$$f_{k,i} = \frac{r_i}{\Phi_{k,i}+r_i},$$

A l'aide de l'équation (110) donnée par la composante k nous pouvons expliciter l'équation matricielle donnée par le système d'équations différentielles.

Les quantités à un seul indice, i, de l'équation (110) sont scalaires.

Les composantes $y_{k,i-1}$, $y_{k,i}$, $y_{k,i+1}$ sont remplacées par les matrices colonnes correspondantes.

On désigne par A_i la matrice formée par les coefficients de la formule de quadrature utilisée pour calculer le terme de photoexcitation :

$$\text{(112)}\qquad \mathbf{A}_i = \begin{vmatrix} \alpha_1\alpha_2 & & \alpha_{N_1N_2}\\ \alpha_1\alpha_2 & & \\ & & \\ \alpha_1\alpha_2 & & \alpha_{N_1N_2} \end{vmatrix}.$$

Les autres paramètres de l'équation (110), c'est-à-dire :

$$a_{k,i},\quad c_{k,i},\quad \gamma_{k,i},\quad l_{k,i}\quad \text{et}\quad f_{k,i},$$

sont remplacés par les matrices diagonales correspondantes : par exemple $\mathbf{a}_i$ est la matrice diagonale dont l'élément de la ligne k est $a_{k,i}$.

On obtient donc :

$$\text{(113)}\quad \begin{aligned} &-\mathbf{a}\,\mathbf{Y}_{i-1}\\ &+\left(\mathbf{a}_i+\mathbf{c}_i+\boldsymbol{\gamma}_i\left(\mathbf{I}-\frac{1}{1+D_i}\,l_i\,\mathbf{A}_i\right)\right)\mathbf{Y}_i\\ &\qquad -\mathbf{c}_i\,\mathbf{Y}_{i+1} = \boldsymbol{\gamma}_i\left(\frac{N_i}{1+D_i}\,l_i + Sc_i\,f_i\right). \end{aligned}$$

Cette équation est analogue à l'équation (94) si l'on pose :

$$(114)\qquad \begin{cases} \mathbf{R}_i = \mathbf{a}_i + \mathbf{c}_i + \mathbf{b}_i, \\ \mathbf{b}_i = \gamma_i \left(\mathbf{I} - \dfrac{1}{1 + \mathrm{D}_i} \mathbf{l}_i \mathbf{A}_i \right), \\ \mathbf{d}_i = \gamma_i \left(\dfrac{\mathrm{Ni}}{1 + \mathrm{D}_i} \mathbf{l}_i + \mathrm{Sc}_i \mathbf{f}_i \right). \end{cases}$$

Les difficultés numériques rencontrées ont conduit à étudier la stabilité de la méthode.

b) *Stabilité de la méthode : études de* Fox *et* Wachspress. — L'étude de la stabilité numérique de la méthode d'élimination a été faite par Fox (1954) et reprise par Wachspress (1966) dans le cas où la fonction y est scalaire.

Nous rappellerons les résultats donnés dans ces deux articles.

Les notations que nous avons utilisées pour exposer la méthode d'élimination sont celles de Wachspress. Son étude montre que la méthode est stable si :

$$s_i \leqslant 1,$$

ce qui est réalisé si a_i et c_i sont positifs et du même ordre de grandeur et si b_i est positif ou nul.

Dans ce cas, l'examen de la relation de récurrence :

$$(115)\qquad s_i = \frac{c_i}{a_i (1 - s_{i-1}) + b_i + c_i}.$$

montre que si s_{i-1} est inférieur ou égal à l'unité, s_i est également inférieur à l'unité. Le dénominateur est alors toujours la somme de trois termes positifs et les différentes relations de récurrence peuvent être calculées sans difficultés.

Si les conditions relatives à a_i, c_i et b_i ne sont pas vérifiées, si par exemple b_i est négatif, le dénominateur peut être voisin de zéro et être calculé avec peu de chiffres significatifs. Dans ce cas s_i devient effectivement supérieur à l'unité.

Dans notre cas a_i et c_i sont essentiellement positifs et du même ordre de grandeur.

$$(116)\qquad b_i = \gamma_i \left(1 - \frac{1}{1 + \mathrm{D}_i} \frac{1}{1 + r_i} \right).$$

Si l'absorption continue est négligeable, le signe de b_i est celui de D_i, Si D_i est négatif il peut donc y avoir instabilité numérique.

Fox fait l'étude d'un tel exemple ; il donne à chaque pas les valeurs numériques des différentes quantités : à une certaine profondeur, la quantité $\mathrm{R}_i - a_i s_{i-1}$ est voisine de zéro et est calculée avec peu de chiffres significatifs. D'après l'étude de Fox l'instabilité a lieu lorsque la fonction y atteint une valeur maximale ou minimale.

Nous n'avons pas fait une étude analogue de la stabilité numérique dans le cas d'un vecteur.

Signalons seulement que lorsque D est positif, les matrices à inverser sont à termes diagonaux positifs, tous les autres termes étant négatifs. En valeur absolue les termes diagonaux sont prépondérants. Le calcul des matrices inverses ne présente pas de difficultés numériques et la méthode d'élimination est stable.

Lorsque D est négatif dans des zones assez profondes où la matrice $\mathbf{b}$ qui dépend de la valeur de D est prépondérante, les matrices perdent leurs propriétés relatives aux signes et à l'ordre de grandeur des termes ; lorsque les calculs sont exécutés avec huit chiffres significatifs, la méthode d'intégration numérique semble assez stable, comme le montrent des essais faits avec différentes valeurs du pas. Mais nous avons rencontré alors une autre difficulté : dans certains cas les solutions intermédiaires obtenues au cours des itérations n'ont aucun sens physique. Nous reviendrons sur ce point plus loin au cours de l'étude des procédés itératifs.

c) Nous avons rencontré des instabilités numériques, également dues à des erreurs d'arrondi, et liées à l'ordre de grandeur des termes figurant dans les équations de transfert.

Ordre de grandeur de D.

La valeur de D pour les raies de résonance est petite ; D intervient dans le calcul de la matrice $\mathbf{b}$; dans le cas scalaire, si l'absorption continue est négligeable, l'équation (116) montre que b différence de l'unité et d'un terme voisin de l'unité, est de l'ordre de grandeur de D. Dans le cas vectoriel il faut effectuer à la profondeur i la différence :

$$\mathbf{I} - \frac{1}{1 + \mathrm{D}_i} \mathbf{l}_i \mathbf{A}_i.$$

Si D_i est petit les erreurs d'arrondi sont importantes. Le calcul en simple précision, c'est-à-dire avec huit chiffres significatifs n'est possible que si D_i est supérieur à 10^{-6}. Pour des valeurs inférieures il faut effectuer les calculs en double précision.

Variation de l'absorption avec la fréquence.

Soit :

$$(117)\qquad \Delta \mathrm{T}_{k,i} = \mathrm{T}_{ki+1} - \mathrm{T}_{k,i}.$$

$\Delta \mathrm{T}_{k,i}$, à une profondeur donnée, dépend de la direction et de la fréquence.

Évaluons le rapport maximal existant entre les

différentes valeurs de $\Delta T_{k,i}$ à une profondeur déterminée :

$$\frac{\Delta T_{max}}{\Delta T_{min}} = \frac{\mu_{max}}{\mu_{max}\,\Phi_{min}}, \tag{118}$$

ΔT_{max}, μ_{max} désignant les valeurs maximales de ΔT et de μ, ΔT_{min}, μ_{min}, Φ_{min} les valeurs minimales de ΔT, μ, Φ. Ce rapport dépend essentiellement de Φ_{max} : μ_{max}/μ_{min}, avec les formules de quadrature utilisées, est petit, inférieur à dix, tandis que Φ_{min}^{-1}, variable évidemment avec la transition, peut atteindre des valeurs de l'ordre de grandeur de 10^{+6}.

Les termes de la matrice à inverser :

$$\mathbf{a}_i\,(\mathbf{I} - \mathbf{s}_{i-1}) + \mathbf{b}_i + \mathbf{c}_i, \tag{119}$$

dépendent des quantités ΔT. Si le rapport $\Delta T_{max}/\Delta T_{min}$ est grand :

$$\Delta T_{max}/\Delta T_{min} > 10^6, \tag{120}$$

les erreurs d'arrondi sont importantes.

C'est pour avoir des termes qui varient comme ΔT et non comme ΔT^2 que nous avons multiplié l'équation de rang k par : $\gamma_{k,i}$ les résultats numériques sont meilleurs.

La limitation de l'intervalle d'intégration numérique vers la surface présente des difficultés liées à l'ordre de grandeur des quantités ΔT.

d) *Limitation de l'intervalle d'intégration numérique vers la surface.* — Considérons le premier intervalle.

Si :

$$\Delta T_{max} \simeq 10^{-3}, \tag{121}$$

$$\Phi_{min}\,\frac{\mu_{min}}{\mu_{max}} \simeq 10^{-6}, \tag{122}$$

alors :

$$\Delta T_{min} \simeq 10^{-9}. \tag{123}$$

Si l'on commence l'intégration numérique à partir de la surface, la matrice $\mathbf{s}_1$ est une matrice diagonale de terme général $1/(1 + \Delta T_{k,1})$. Le terme prépondérant de la matrice à inverser à la profondeur suivante est $\mathbf{c}_2$, mais on ne peut négliger le terme :

$$\mathbf{a}_2\,(\mathbf{I} - \mathbf{s}_1).$$

Les erreurs d'arrondi sont importantes si ΔT_{max} est petit, et, si ΔT_{max} est trop grand, le calcul de la variation de $\mathbf{Y}$ est imprécis.

Il est facile de contrôler l'instabilité numérique due à une valeur de ΔT_{max} non convenablement choisie. On fait varier la valeur de ΔT_{max} du premier intervalle par valeurs croissantes et on examine la valeur obtenue pour $\sum_k \alpha_k\, y_k$ à la surface : quand ΔT_{max} est très petit on obtient des valeurs alternativement positives et négatives, ensuite sur un long intervalle de variation de ΔT_{max} une solution parfaitement stable, enfin pour ΔT_{max} trop grand une valeur de $\sum_k \alpha_k\, y_k$, à la surface, lentement variable.

La valeur de ΔT_{max} du premier intervalle peut être comprise entre environ 10^{-4} et 10^{-2}.

On peut choisir une valeur d'autant plus grande que la fonction D figurant au dénominateur de la fonction source est plus petite : plus D est petit, plus la fonction source est lentement variable à la surface, plus il est possible de choisir une grande valeur pour le pas initial. En calculant en double précision on réduit énormément les erreurs d'arrondi, et il est possible de commencer l'intégration avec des valeurs beaucoup plus petites du pas initial. L'expérience a montré que les résultats étaient légèrement meilleurs quand l'intégration numérique était commencée à partir de la surface.

Disons un mot du pas utilisé : il dépend essentiellement de la variation des différentes fonctions en fonction de la profondeur optique. En général, pour les fonctions assez lentement variables que nous avons rencontrées, un pas fixe en log τ de l'ordre de 0,1 à 0,2 donne de bons résultats.

Au cours de ce chapitre nous avons exposé la méthode d'intégration numérique de Fox adaptée aux équations de transfert du rayonnement par Feautrier.

Cette méthode est facilement applicable ; la formulation des équations différentielles du transfert du rayonnement est simple, que les profils d'absorption et d'émission soient ou non indépendants de la profondeur, que la diffusion soit ou non complètement incohérente.

La méthode d'intégration numérique de Fox est généralement stable. Il peut y avoir instabilité numérique si le paramètre D de la fonction source est négatif, ou si certains paramètres, D ou les profils dans les ailes, sont très petits. Il suffit alors d'effectuer les calculs en double précision.

L'intégration numérique est effectuée sur un intervalle fini de profondeur optique. A la surface, la méthode d'intégration numérique est instable si l'intervalle optique du premier pas est supérieur à 10^{-4}. Aux grandes profondeurs on limite l'intervalle à la profondeur où la microréversibilité des processus radiatifs des transitions considérées est réalisée.

Nous allons étudier la non-microréversibilité des processus radiatifs, et en déduire la profondeur à

laquelle on peut admettre qu'il y a effectivement microréversibilité. Nous donnerons ensuite quelques exemples.

IV. Étude de la non-microréversibilité des processus radiatifs.

Nous rappellerons les conditions bien connues de microréversibilité des processus radiatifs concernant la fonction source et les dimensions du milieu.

1) Si à l'absorption d'un photon se propageant dans une direction correspond l'émission d'un photon dans la même direction, les coefficients d'émission et d'absorption sont liés par l'équation :

$$\text{(124)} \qquad Es = \varkappa I,$$

d'où

$$\text{(125)} \qquad S = I = Es/\varkappa.$$

D'après l'équation de transfert (81) l'intensité et la fonction source sont donc constantes.

2) Les équations de transfert (89) ont pour solution à la profondeur optique τ :

$$\text{(126)} \quad I(+\mu) = \exp\left(\frac{\tau}{\mu}\right)\int_{\tau}^{\infty} S \exp\left(-\frac{t}{\mu}\right) d\left(\frac{t}{\mu}\right),$$

$$\text{(127)} \quad I(-\mu) = \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)\int_{0}^{\tau} S \exp\left(+\frac{t}{\mu}\right) d\left(\frac{t}{\mu}\right),$$

solution qui est :

$$\text{(128)} \qquad I(+\mu) = S,$$

$$\text{(129)} \qquad I(-\mu) = S\left(1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)\right),$$

si la fonction source est constante.

L'intensité se propageant de l'extérieur vers l'intérieur n'est constante que si τ est infini : le milieu doit donc être de dimension infinie.

L'intensité moyenne a pour valeur à la profondeur τ :

$$\text{(130)} \qquad y = S\left(1 - \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right)\right).$$

La condition de microréversibilité imposée à la fonction source si l'on considère l'intensité moyenne est moins restrictive ; il doit y avoir autant de photons absorbés que de photons émis pour l'ensemble des deux orientations opposées, ce qui donne la condition :

$$y = S.$$

D'après l'équation (87) il suffit que S soit une fonction linéaire de la profondeur optique.

Nous considérerons des milieux plans parallèles semi-infinis. Du fait de la discontinuité du milieu la fonction source présente une certaine courbure et dans les régions voisines de la surface l'intervalle d'intégration n'est pas infini.

Cependant si la profondeur optique et l'opacité sont suffisamment grandes, on peut considérer que les conditions de microréversibilité sont satisfaites : la fonction source est lentement variable, et, à partir d'une certaine profondeur, l'intervalle d'intégration peut être considéré comme infini. Nous allons préciser ceci dans ce chapitre.

Lorsque la fonction source est une fonction linéaire de la profondeur optique, et qu'il n'y a pas alors d'effet de courbure, il est possible de calculer l'intensité moyenne et donc la non microréversibilité à partir de l'équation (130). Aux grandes profondeurs, la non-microréversibilité est due évidemment aux zones de fréquences transparentes, en particulier aux ailes des raies. On peut donc prévoir l'importance du profil d'absorption.

Nous allons étudier l'influence de la non-microréversibilité sur la valeur de la fonction source d'une transition et sur celles des coefficients d'écarts à l'équilibre thermodynamique local. En supposant l'absorption continue négligeable nous chercherons ensuite à déterminer à partir de quelle profondeur il y a microréversibilité des processus radiatifs ; cette profondeur dépend des profils d'absorption et d'émission. Nous considérerons ensuite le cas où l'absorption continue ne peut être négligée. Enfin nous verrons au cours de l'étude d'une transition liée-libre le rôle important que peut jouer la courbure de la fonction source.

1) *Influence de la non-microréversibilité des processus radiatifs sur la fonction source.*

Le bilan de l'énergie absorbée et émise par seconde, par centimètre cube, par intervalle de fréquence égal à l'unité, par unité d'angle solide, dans le cas d'une transition liée-liée, est :

$$\text{(132)} \quad A = N_k A_{kj}\frac{h\nu}{4\pi} j_\nu + N_k B_{kj}\frac{h\nu}{4\pi}\psi_\nu I_\nu - N_j B_{jk}\frac{h\nu}{4\pi}\varphi_\nu I_\nu,$$

$$= N_k A_{kj}\frac{h\nu}{4\pi} j_\nu \left(1 + \frac{\psi_\nu}{j_\nu}\frac{c^2}{2h\nu^3} I_\nu - \frac{N_j}{N_k}\frac{g_k}{g_j}\frac{c^2}{2h\nu^3}\frac{\varphi_\nu}{j_\nu} I_\nu\right),$$

$$= N_k A_{kj}\frac{h\nu}{4\pi} j_\nu \left(1 - I_\nu \frac{c^2}{2h\nu^3}\left(\frac{b_j}{b_k}\exp(h\nu/kTe) - \frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}\right)\frac{\varphi_\nu}{j_\nu}\right),$$

d'où :

$$(133) \qquad A = N_k A_{ki} \frac{h\nu}{4\pi} j_\nu (1 - I_\nu/S_{jk\nu}),$$

$$(134) \qquad A = E_s(1 - I/S),$$

$$(135) \qquad A = \varkappa S(1 - I/S),$$

La non-microréversibilité mesurée en nombre de processus par centimètre cube et par seconde pour la transition jk est :

$$(136) \quad \Delta'_{kj} = \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{A}{h\nu} d\omega \, d\nu,$$

$$= N_k A_{kj} \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} \int_0^\infty J_\nu \psi_\nu \, d\nu - \frac{N_j}{N_k} \frac{g_k}{g_j} \frac{c^2}{2h\nu^3} \int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu\right).$$

$$= N_k A_{kj} \left(1 - \left(\frac{c^2}{2h\nu^3} \int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu\right) \left[\frac{b_j}{b_k} \exp(h\nu/kT_e) - \frac{\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu \, d\nu}{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu}\right]\right).$$

Thomas (1948) désigne par N. R. B. (Net-Radiative-Bracket) la quantité entre crochets :

$$(137) \quad \delta_{kj} = 1 - \frac{c^2}{2h\nu^3} \left(\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu\right) \left[\frac{b_j}{b_k} \exp(h\nu/kT_e) - \frac{\int_0^\infty J_\nu \psi_\nu \, d\nu}{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu}\right],$$

qui est égale à :

$$(138) \qquad \delta_{jk} = 1 - \frac{\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu}{S_{jk}},$$

lorsque la diffusion est complètement incohérente. Il est possible d'introduire une quantité analogue pour les transitions liées-libres. Nous donnons directement le bilan global des processus radiatifs par centimètre cube et par seconde.

$$(139) \quad \Delta'_j = N_p \left(\frac{N_j}{N_p}\right)^* \left[\int_{\nu_j}^\infty \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \alpha_\nu \, d\nu + \int_{\nu_j}^\infty J_\nu \exp(-h\nu/kT_e) \alpha_\nu \, d\nu - \frac{N_j}{N_p} \left(\frac{N_p}{N_j}\right)^* \int_{\nu_j}^\infty J_\nu \alpha_\nu \, d\nu\right],$$

$$= N_p \left(\frac{N_j}{N_p}\right)^* \int_{\nu_j}^\infty \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \alpha_\nu \left(1 - \frac{J_\nu}{S_{j\nu}}\right) d\nu.$$

On peut introduire dans les équations d'équilibre statistique le bilan global des processus radiatifs.

$$\Delta_{kj} = g_k \exp(W_k/kT_e) \Delta'_{kj}/N_k,$$

$$= R_{kj} - b_j P_{jk}/b_k,$$

$$\Delta_j = g_j \exp(W_j/kT_e) \Delta'_j \, b_j/N_j,$$

$$= R_j - b_j P_j.$$

Le seul terme de rayonnement figurant dans les équations d'équilibre statistique pour chaque transition est le bilan global Δ_{kj} ou Δ_j assimilé au terme de désexcitation ou de recombinaison.

Δ'_{kj} et Δ'_j désignent le bilan des processus radiatifs par centimètre cube, δ_{kj} le bilan par photon émis, Δ_{kj} et Δ_j le bilan à un facteur près. Par la suite nous désignerons soit par bilan, soit par non-microréversibilité, terme qui en réalité désigne un phénomène physique, l'une ou l'autre de ces quantités. Le symbole utilisé précisera chaque fois la quantité désignée.

Établissons les relations entre les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique, et également les fonctions sources, et le bilan des processus radiatifs.

L'étude faite sur les expressions des coefficients d'écarts à l'équilibre thermodynamique en fonction des coefficients des équations d'équilibre statistique reste valable.

Soit donc la transition liée-liée jk.

Le rapport b_k/b_j donné par l'équation (69) devient si l'on introduit dans les équations d'équilibre statistique le bilan global des processus radiatifs de la transition jk :

$$(142) \qquad \frac{b_k}{b_j} = \frac{N'}{\Delta_{kj} + D'},$$

d'où :

$$(143) \quad \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{b_k}{b_j} \exp(-h\nu/kT_e) = \frac{N}{D'' + \delta_{kj}}.$$

L'expression (73) de la fonction source devient :

$$(144) \quad S_{jk\nu} = \frac{N}{\delta_{kj} + D'' - N \frac{c^2}{2h\nu^3} \frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}} \frac{j_\nu}{\varphi_\nu}.$$

S'il y a microréversibilité des processus radiatifs :

$$\delta_{kj} = 0,$$

$$(145)\qquad S_{jk\nu} = \frac{N}{D'' - N\dfrac{c^2}{2h\nu^3}\dfrac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu}.$$

Si la diffusion est complètement incohérente :

$$(146)\qquad S_{jk} = \frac{N}{\delta_{kj} + D'' - N\dfrac{c^2}{2h\nu_\nu}},$$

soit :

$$(147)\qquad S_{jk} = \frac{N}{\delta_{kj} + D},$$

et, s'il y a microréversibilité des processus radiatifs :

$$(148)\qquad S_{jk} = \frac{N}{D}.$$

Pour une transition liée-liée, on a de même :

$$(149)\qquad \frac{1}{b_j} = \frac{N'}{D' + \Delta_j}.$$

$$(150)\qquad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\exp(-h\nu/kT_e)\frac{N'}{D + \Delta_j}.$$

$$(151)\qquad D = D' - N'\exp(-h\nu/kT_e).$$

S'il y a microréversibilité des processus radiatifs :

$$(152)\qquad \Delta = 0,$$

$$S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2}\exp(-h\nu/kT_e)\frac{N'}{D}.$$

Les diverses formules donnent directement l'influence de la non-microréversibilité sur les valeurs des coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local et sur celles des fonctions source.

Il y a microréversibilité strictement si :

$$\delta_{kj} = 0,$$
$$\Delta_j = 0.$$

En réalité, d'après les diverses formules, on pourra admettre qu'il y a microréversibilité si :

$$(153)\qquad \begin{cases} \delta_{kj} \ll D, \\ \Delta j \ll D, \end{cases}$$

par exemple si :

$$(154)\qquad \begin{cases} \delta_{kj} \simeq \dfrac{1}{100} D, \\ \Delta_j \simeq \dfrac{1}{100} D. \end{cases}$$

Dans le cas simple où la fonction source est constante, il est possible de calculer δ_{kj} et Δ_j, et d'évaluer la profondeur à partir de laquelle il y a microréversibilité des processus radiatifs.

2) *Profondeur optique limite d'intégration : transition liée-liée.*

Nous supposons les profils d'absorption et d'émission induite identiques et les paramètres de la fonction source constants.

La solution constante à l'infini du système d'équations différentielles :

$$\frac{dI_\nu}{dI_\nu} = I_\nu - S_{jk\nu},$$

où $S_{kj\nu}$ est donnée par l'équation (74), est :

$$(155)\qquad S_{jk\nu} = I_\nu = \frac{N}{D'' - N\dfrac{c^2}{2h\nu^3}\dfrac{j_\nu}{\varphi_\nu}},$$

$$= \frac{N}{D}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu},$$

identique évidemment à la solution correspondant à la microréversibilité des processus radiatifs.

La solution atteint, en fait, sa valeur constante, à une profondeur finie, lorsque la condition de microréversibilité :

$$\delta_{kj} \ll D,$$

est vérifiée.

Calculons la non-microréversibilité en supposant que la fonction source est constante :

$$(156)\qquad \delta_{kj} = \int_0^\infty \left[\int_{4\pi}\left(1 - \frac{I_\nu}{S_{jk\nu}}\right)\frac{d\omega}{4\pi}\right] j_\nu\, d\nu.$$

D'après les équations (128) et (129), on a :

$$1 - \frac{I_\nu}{S_{jk\nu}} = 0,$$

ou :

$$1 - \frac{I_\nu}{S_{jk\nu}} = \exp\left(-\frac{\tau_\nu}{\mu}\right),$$

suivant l'orientation considérée suivant la direction définie par μ, d'où :

$$(157)\qquad \delta_{kj} = \int_0^\infty \frac{1}{4\pi}\left[\int_0^{\pi/2}\exp\left(-\frac{\tau_\nu}{\cos\theta}\right) 2\pi\sin\theta\, d\theta\right] j_\nu\, d\nu,$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^\infty j_\nu\, E_2(\tau_\nu)\, d\nu,$$

soit, en posant :

$$\tau_\nu = \tau\varphi_\nu,$$

où τ est donc une profondeur optique moyenne,

$$\delta_{kj} = \frac{1}{2}\int_0^\infty j_\nu \, E_2(\tau\varphi_\nu)\, d\nu. \tag{158}$$

Nous poserons :

$$K_2(\tau) = \int_0^\infty j_\nu \, E_2(\tau\varphi_\nu)\, d\nu, \tag{159}$$

et considérerons la profondeur limite τ_l définie par l'équation :

$$\frac{1}{2} K_2(\tau) = D. \tag{160}$$

Il y a microréversibilité des processus radiatifs à des profondeurs optiques supérieures à τ_l puisque δ_{kj} doit être en fait très inférieur à D. A la profondeur τ_l la fonction source est égale à la moitié de la valeur limite atteinte aux grandes profondeurs lorsqu'il y a effectivement microréversibilité, si le calcul de la non-microréversibilité effectué en supposant la fonction source constante est valable.

Dans le dernier chapitre nous donnerons la signification physique de la constante D et de la comparaison de cette constante à la non-microréversibilité radiative de la transition.

Cette notion de profondeur limite, représentant la profondeur optique moyenne qu'un photon peut traverser, a été discutée par Jefferies (1960) et Avrett et Hummer (1965).

Dans le cas d'un atome à deux niveaux discrets, en supposant la diffusion incohérente, Avrett et Hummer ont calculé à partir de quelle épaisseur Λ un milieu d'épaisseur finie pouvait être considéré comme optiquement épais. La longueur Λ appelée longueur de thermalisation, est définie par l'équation :

$$\int_0^\infty \varphi_\nu \, E_2(\tau\varphi_\nu)\, d\nu = D, \tag{161}$$

soit :

$$K_2\left(\frac{\Lambda}{2}\right) = D. \tag{162}$$

La condition imposée à Λ est équivalente à celle que nous donnons. La non-microréversibilité dans la région centrale où la fonction source est supposée avoir atteint sa valeur constante est égale à $2\,\delta_{kj}$.

La profondeur de thermalisation est donc définie par l'équation :

$$2\delta_{kj} = D, \tag{163}$$

$$K_2\left(\frac{\Lambda}{2}\right) = D. \tag{164}$$

TABLEAU I

τ	Profil Doppler	Profil de Voigt		
		$a = 10^{-3}$	$a = 10^{-3}$	$a = 10^{-1}$
10	$0{,}33\ 10^{-1}$	$0{,}33\ 10^{-1}$	$0{,}37\ 10^{-1}$	$0{,}66\ 10^{-1}$
10^2	$0{,}23\ 10^{-2}$	$0{,}25\ 10^{-2}$	$0{,}48\ 10^{-2}$	$0{,}19\ 10^{-1}$
10^3	$0{,}185\ 10^{-3}$	$0{,}40\ 10^{-3}$	$0{,}18\ 10^{-2}$	$0{,}66\ 10^{-2}$
10^4	$0{,}16\ 10^{-4}$	$0{,}17\ 10^{-3}$	$0{,}66\ 10^{-3}$	$0{,}21\ 10^{-2}$
10^5	$0{,}14\ 10^{-5}$	$0{,}66\ 10^{-4}$	$0{,}21\ 10^{-3}$	$0{,}66\ 10^{-3}$
10^6	$0{,}13\ 10^{-6}$	$0{,}21\ 10^{-4}$	$0{,}66\ 10^{-4}$	
10^7	$0{,}12\ 10^{-7}$	$0{,}66\ 10^{-5}$		

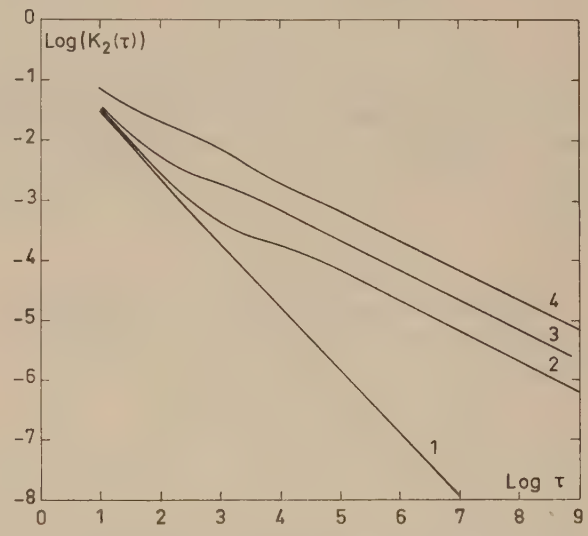

Fig. 1. — Non-microréversibilité des processus radiatifs d'une transition liée-liée due à la dimension semi-infinie du milieu, la fonction source étant constante.

$$K_2(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \, E_2(\tau\varphi(x))\, dx.$$

1. Profil Doppler.
2. Profil de Voigt $a = 10^{-3}$.
3. Profil de Voigt $a = 10^{-2}$.
4. Profil de Voigt $a = 10^{-1}$.

Le tableau I et la figure 1 donnent les valeurs de la fonction $K_2(\tau)$ pour un profil Doppler :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \tag{165}$$

$$x = \frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_D}, \tag{166}$$

et pour un profil de Voigt :

$$\varphi(x) = \frac{a}{\pi^{3/2}}\int_0^\infty \frac{\exp(-y^2)}{a^2 + (x-y)^2}\, dy. \tag{167}$$

Comme l'indiquent Avrett et Hummer (1965),

TABLEAU II

D	Profil Doppler		Profil de Voigt $a = 10^{-3}$		$a = 10^{-2}$		$a = 10^{-1}$	
	Log τ_l	Log x_l	Log τ_l	Log x_l	Log τ_l	Log x_l	Log τ_l	Log x_l
—	—	—	—	—	—	—	—	—
10^{-2}	1,17	0,21	1,20	0,21	1,25	0,23	2	0,43
10^{-3}	2,05	0,33	2,10	0,34	2,80	0,42	4	1,36
10^{-4}	3	0,42	3,75	0,48	5	1,36	6	2,36
10^{-5}	3,90	0,47	6	1,36	7	2,36	8	3,36

dans le cas d'un profil Doppler la fonction $K_2(\tau)$ est sensiblement inversement proportionnelle à τ :

$$K_2(\tau) = \frac{A}{\tau}, \tag{168}$$

le coefficient A variant de 0,33 à 0,12 lorsque τ varie de 10 à 10^7, et, dans le cas d'un profil de Voigt, pour τ suffisamment grand ($\tau > 10^2$), proportionnelle à $(a/\tau)^{1/2}$:

$$K_2(\tau) = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{a}{\tau}}. \tag{169}$$

Le tableau II donne la valeur de τ_l pour diverses valeurs de D pour un profil Doppler et un profil de Voigt.

τ_l est défini par l'équation :

$$K_2(\tau_l) = 2D, \tag{170}$$

d'où :

$$\tau_l = \frac{A}{2D}, \tag{171}$$

dans le cas d'un profil Doppler,
et :

$$\tau_l = \frac{a}{9D^2}, \tag{172}$$

dans le cas d'un profil de Voigt, si l'expression (169) de $K_2(\tau)$ est valable.

La condition de microréversibilité effective :

$$\delta_{kj} = D/K, \tag{173}$$

où K par exemple est de l'ordre de 100 donne les profondeurs limites réelles d'intégration :

$$\tau_L = K\frac{A}{2D}, \tag{174}$$

et

$$\tau_L = K^2\frac{a}{9D^2}. \tag{175}$$

Tous ces calculs ont été faits avec l'hypothèse de la diffusion complètement incohérente. Si cette hypothèse n'est pas valable, il faut tenir compte du profil d'émission j_ν ; il est possible d'effectuer les calculs analogues.

La valeur numérique de la fonction $K_2(\tau)$ au grandes profondeurs dépend essentiellement des ailes du profil, la fonction E_2 étant infiniment petite pour les grandes valeurs de la variable. Il est donc nécessaire que les formules de quadrature utilisées pour calculer les termes de rayonnement représentent un domaine de fréquences suffisamment grand.

Nous nous proposons donc d'étudier la largeur utile des profils.

3) *Largeur utile des profils d'émission et d'absorption.*

Nous considérons toujours le cas où la fonction source est indépendante de la profondeur optique et où la diffusion est complètement incohérente.

La non-microréversibilité est donnée par :

$$\delta_{kj} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx, \tag{176}$$

$$f(x) = \varphi(x)\,E_2(\tau\varphi(x)). \tag{177}$$

Lorsque τ est grand, la fonction $f(x)$ est infiniment petite à l'origine ; elle croît avec x jusqu'à une valeur maximale atteinte lorsque $f'(x)$ s'annule :

$$E_2(\tau\varphi(x_M)) = \tau\varphi(x_M)\,E_1(\tau\varphi(x_M)). \tag{178}$$

A l'aide de tables des fonctions E_1 et E_2 il est aisé de résoudre cette équation :

$$\tau\varphi(x_M) = 0.61, \tag{179}$$

$$E_2(0.61) = 0.271, \tag{180}$$

$$f(x_M) = 0.165/\tau. \tag{181}$$

Le maximum est à l'origine pour :

$$\tau = 0.61/\varphi(0). \tag{182}$$

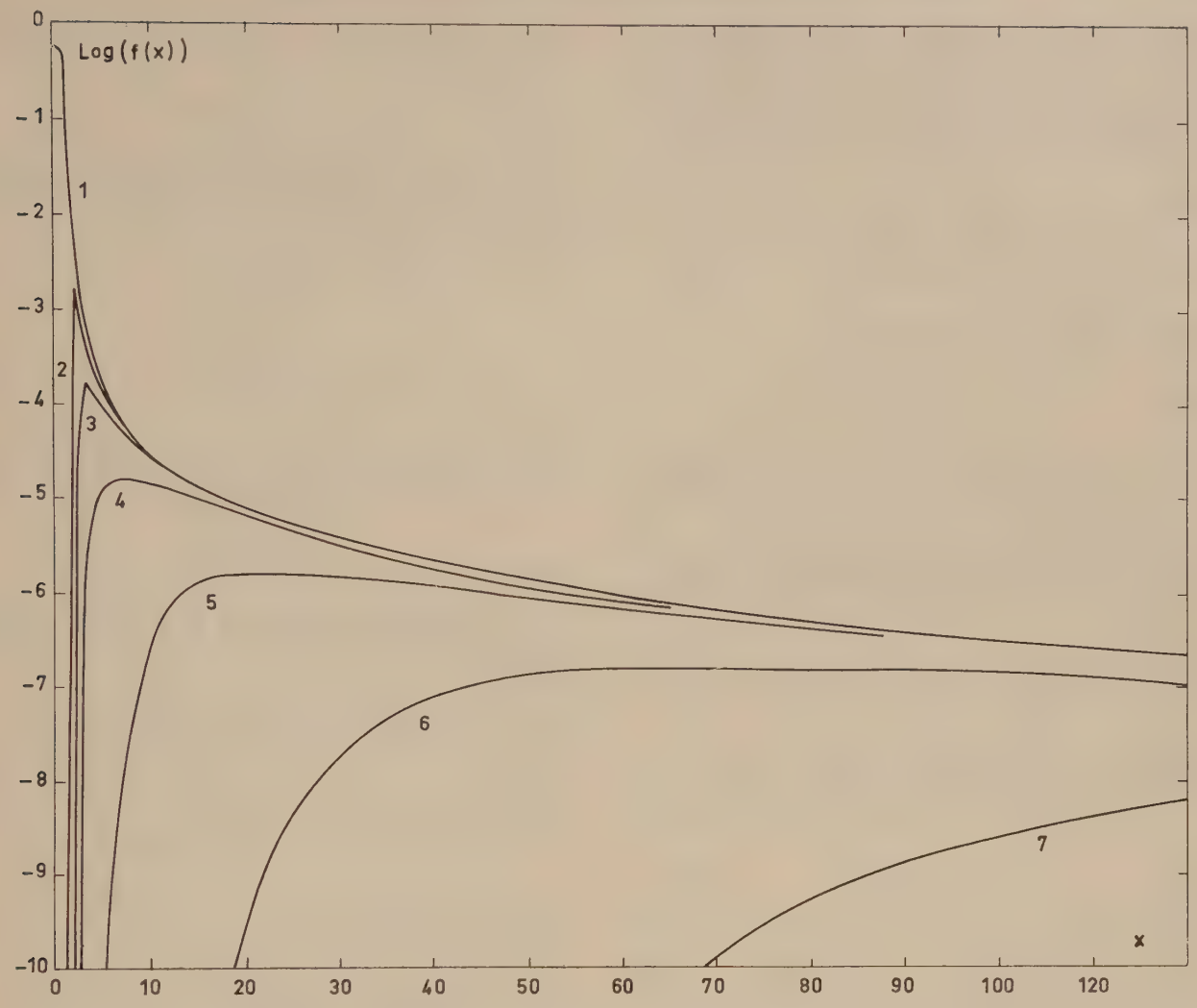

FIG. 2. — Fonction $f(x)$ pour un profil de Voigt pour diverses valeurs de la profondeur optique $f(x) = \varphi(x)$, $E_2(\tau\varphi(x))$ $a = 10^{-2}$.

1. Profil de Voigt.
2. Log $(f(x))$ pour $\tau = 10^2$.
3. » » $\tau = 10^3$.
4. » » $\tau = 10^4$.
5. » » $\tau = 10^5$.
6. » » $\tau = 10^6$.
7. » » $\tau = 10^7$.

Ensuite la fonction $f(x)$, lorsque x croît à partir de la valeur x_M, décroît et tend vers φ puisque E_2 tend l'unité.

La figure 2 donne les fonctions $f(x)$ pour différentes valeurs de τ dans le cas d'un profil de Voigt.

Lorsque τ est suffisamment grand, la fonction $f(x)$ est pratiquement nulle jusqu'à des valeurs de x voisines de x_M. La non-microréversibilité est donc due essentiellement aux ailes du profil, et de façon plus précise aux valeurs de x extérieures à l'intervalle $(-x_M, +x_M)$.

A la fréquence définie par x_M la profondeur optique est égale à 0.61 ; à cette fréquence le milieu devient transparent.

On peut calculer la valeur de x_M en fonction de τ. Dans le cas d'un profil Doppler :

$$x_M = \sqrt{\mathrm{Ln}\,\frac{\tau}{0.61\sqrt{\pi}}} \simeq \sqrt{\mathrm{Ln}\,\tau}, \tag{183}$$

et dans le cas d'un Profil de Voigt :

$$x_M = \sqrt{\frac{a}{\pi}\,\frac{\tau}{0.61}}\,; \tag{184}$$

pour x grand, en effet :

$$\varphi(x) \simeq \frac{a}{\pi}\,\frac{1}{x^2}. \tag{185}$$

Il faut qu'à chaque profondeur, l'intervalle d'intégration sur les fréquences s'étende au-delà de x_M. En particulier à la profondeur τ_l, x_M doit être situé dans l'intervalle d'intégration, qui doit donc être supérieur à :

$$x_l = x_M(\tau_l) ; \tag{186}$$

$$x_l = \sqrt{\mathrm{Ln}\left(\frac{A}{2D}\right)}, \tag{187}$$

dans le cas d'un profil de Doppler,

$$x_l = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{1}{0{,}61\,\pi}\frac{a}{D}}, \tag{188}$$

dans le cas d'un profil de Voigt, lorsque les expressions asymptotiques du profil $\varphi(x)$ et de la fonction $K_2(\tau)$ sont valables.

Le tableau II donne quelques valeurs de x_l.

Les valeurs de τ_l et de x_l calculées sont en réalité très inférieures aux limites d'intégration qui doivent être utilisées.

A la profondeur τ_L définie par l'équation (173) la position du maximum de $f(x)$ est :

$$x_L = \sqrt{\mathrm{Ln}\frac{A}{2D} + \mathrm{Ln}\,K}, \tag{189}$$

où :

$$x_L = x_l K, \tag{190}$$

suivant qu'il s'agit d'un profil Doppler ou d'un profil de Voigt.

Dans le cas d'un profil de Voigt, l'importance des ailes est due à la décroissance en $1/x^2$ du profil.

Si l'intervalle de fréquences est limité à x_L la non-microréversibilité à la profondeur τ_L est pratiquement annulée, alors qu'elle devrait être égale à D/K : l'erreur relative commise sur la fonction source est donc égale à 1/K. Si K est de l'ordre de 100, cette erreur est négligeable.

Nous verrons plus loin au cours de l'étude des applications l'influence de la largeur de profil utilisée sur la fonction source calculée.

4) *Courbure de la fonction source aux grandes profondeurs optiques.*

Nous avons calculé la non-microréversibilité aux grandes profondeurs optiques en ne tenant compte que de la dimension semi-infinie du milieu et en supposant la fonction source constante. Il est possible de montrer que lorsque les paramètres de la fonction source sont constants l'effet de courbure est négligeable.

On peut évaluer cet effet en admettant que la fonction source puisse être localement représentée par une parabole :

$$S = a + b\tau + c\tau^2, \tag{191}$$

où τ est la profondeur optique moyenne.

L'expression de la fonction source à la fréquence ν, en fonction de la profondeur optique suivant la direction définie par μ, est :

$$S = a + b'T + c'T^2,$$

$$c' = c\frac{\mu^2}{\varphi^2}.$$

Si l'intervalle d'intégration est supposé infini de part et d'autre, du point considéré où l'on veut calculer l'effet de courbure, il est facile de montrer que :

$$1 - \frac{y}{S} = -\frac{2c'}{S}.$$

La non-microréversibilité à la fréquence ν est donc égale à :

$$\frac{2}{4\pi}\int_{2\pi}\left(1-\frac{y}{S}\right)d\omega = -\frac{2}{4\pi}\frac{2c}{S}\frac{1}{\varphi^2}\int_0^{\pi/2} 2\pi\cos^2\theta\sin\theta\,d\theta, \tag{192}$$

$$= -\frac{2c}{S}\frac{1}{\varphi^2}\frac{1}{3}.$$

Si on ne considère que les régions centrales de la raie où le profil varie peu, qui ont un poids de l'ordre de l'unité, et pour lesquelles seulement la représentation parabolique locale de la fonction source est valable, on constate que la valeur de la non-microréversibilité, qui est de l'ordre de grandeur de c/s est négligeable aux grandes profondeurs.

Il est possible d'évaluer la courbure locale si la non-microréversibilité n'est due qu'à la dimension semi-infinie du milieu.

Considérons par exemple le cas d'un profil de Voigt :

$$\delta \simeq \frac{1}{3}\sqrt{a}\,\tau^{-\frac{1}{2}} \simeq A\tau^{-\frac{1}{2}},$$

$$S = \frac{N}{D+\delta}.$$

$$c = \frac{1}{2}\frac{d^2S}{d\tau^2},$$

d'où :

$$\frac{d^2S}{d\tau^2} = \frac{N}{(D+\delta)^2}A\tau^{-\frac{5}{2}}\left[-\frac{2}{D+\delta}\frac{1}{4}A\tau^{-\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right] \tag{193}$$

ce qui donne :

$$\frac{c}{S} \simeq \frac{1}{8}\frac{1}{D+\delta} A\tau^{-\frac{5}{2}}\left[-\frac{2}{D+\delta} A\tau^{-\frac{1}{2}} - 3\right].$$

Pour les valeurs numériques suivantes :

$$N = 10^{-4},$$
$$D = 10^{-4},$$
$$a = 10^{-2},$$

on peut calculer $\left(-\frac{c}{s}\right)$ à la profondeur τ_l :

$$-\frac{c}{S} \approx 2{,}66\ 10^{-11},$$

alors que δ est égal à 10^{-4}.

L'évaluation de l'effet de courbure dans les ailes du profil est compliquée ; nous ne la ferons pas. La valeur de la non-microréversibilité donnée aux grandes profondeurs par l'intégration numérique des équations de transfert montre que l'effet de courbure est négligeable lorsque les paramètres de la fonction source sont constants. Dans les cas réels il n'en est pas toujours ainsi : la fonction source de Lyman α avec un modèle de chromosphère à fort gradient de température présente une courbure importante.

Dans certains cas il est nécessaire de tenir compte de l'absortion et de l'émission continues.

5) *Influence de l'absorption et de l'émission continues.*

La non-microréversibilité des processus radiatifs d'une transition peut dépendre de façon importante de l'absorption et de l'émission continues.

La fonction source est :

$$S = \frac{S_{jk} + \frac{r}{\Phi} S_c}{1 + \frac{r}{\Phi}}. \tag{194}$$

Si :

$$S_{jk} \neq S_c,$$

il n'y a pas microréversibilité des processus radiatifs de la transition jk, même aux fréquences où l'opacité et la profondeur optiques sont grandes.

D'après les équations (128) et (129) on a alors :

$$J = S,$$

où S est la fonction source de l'ensemble des processus intervenant à la fréquence considérée.

A la fréquence ν la non-microréversibilité des processus de la transition jk due à la présence du continu est :

$$\delta_{jk\nu} = \varphi_\nu\left(1 - \frac{J}{S_{jk}}\right) = \varphi_\nu\left(1 - \frac{1 + \frac{r}{\Phi_\nu}\frac{S_c}{S_{jk}}}{1 + \frac{r}{\Phi_\nu}}\right). \tag{195}$$

On peut évaluer :

$$\delta_{kj} = \int_0^\infty \delta_{jk\nu}\, d\nu, \tag{196}$$

sans en faire le calcul complet.

Dans les régions centrales de la raie, où :

$$\frac{r}{\Phi_\nu} \ll 1.$$

$$\delta_{jk\nu} \simeq \varphi_\nu \frac{r}{\Phi_\nu}\left(1 - \frac{S_c}{S_{jk}}\right). \tag{197}$$

Les régions centrales de la raie qui ont un poids de l'ordre de l'unité donne une valeur de non-microréversibilité de l'ordre de :

$$r\left(1 - \frac{S_c}{S_{jk}}\right). \tag{198}$$

Si le rapport S_c/S_{jk} est de l'ordre de quelques unités, il suffit que r soit de l'ordre de grandeur de D pour que l'influence du continu sur la fonction source soit non négligeable. L'effet du continu est de donner une solution intermédiaire entre la fonction source correspondant à l'absorption continue négligeable et la fonction source continue. La fonction source atteint plus rapidement aux grandes profondeurs la valeur limite, et la largeur utile des profils est inférieure à celle qui a été définie dans le cas où l'absorption continue est négligeable.

Nous donnerons maintenant quelques exemples qui illustreront essentiellement les résultats de la discussion précédente.

6) *Applications.*

Nous avons résolu les équations de transfert du rayonnement pour les valeurs suivantes des paramètres de la fonction source :

$$\begin{cases} N = 10^{-4} & r = 0, \\ D = 10^{-4} \quad \text{ou :} & r = 10^{-4}, \\ N/D = 1, \end{cases} \tag{199}$$

et différents types de profil : profil Doppler et profil de Voigt.

L'intensité moyenne J est calculée à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Legendre à deux points : les essais ont montré que l'anisotropie du rayonnement est bien représentée (1/100) par une formule n'utilisant que deux directions.

Nous avons toujours supposé la diffusion complètement incohérente.

a) *Profil Doppler.* — L'intégrale :

$$\int_0^\infty J_\nu \varphi_\nu \, d\nu,$$

est calculée à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Hermite à 7 points sur le demi-profil, qui assure la représentation d'un domaine de fréquences bien supérieur à :

(200) $$x_l = 2{,}6.$$

Nous n'avons traité que le cas où l'absorption continue est négligeable. La figure 3 donne la variation de la fonction source en fonction de la profondeur optique au centre de la raie.

Le résultat de l'intégration numérique permet de contrôler l'étude de la non-microréversibilité.

D'après le tableau II la profondeur τ_l est égale à 10^3. La profondeur optique au centre de la raie est :

(201) $$\tau = \tau_l \, \varphi(0),$$
$$= 0{,}56 \, 10^3.$$

A cette profondeur, la fonction source est approximativement égale à 0,5, valeur qui justifie le calcul de la non-micoréversibilité effectuée avec l'hypothèse de la fonction source constante et en ne tenant compte que de la dimension semi-infinie du milieu qui donne aux intensités se propageant de la surface vers l'intérieur, qui sont nulles à la surface, une valeur différente de la fonction source.

D'après la même évaluation de la non-microréversibilité, la fonction source doit atteindre la valeur limite à 1/100 près à une profondeur optique au centre de la raie égale à :

(202) $$\tau = 100 \, \tau_l,$$
$$= 0{,}56 \, 10^5,$$

ce qui est confirmé par le résultat de l'intégration numérique.

b) *Profil de Voigt.* — La constante d'amortissement est égale à :

(203) $$a = 10^{-2}.$$

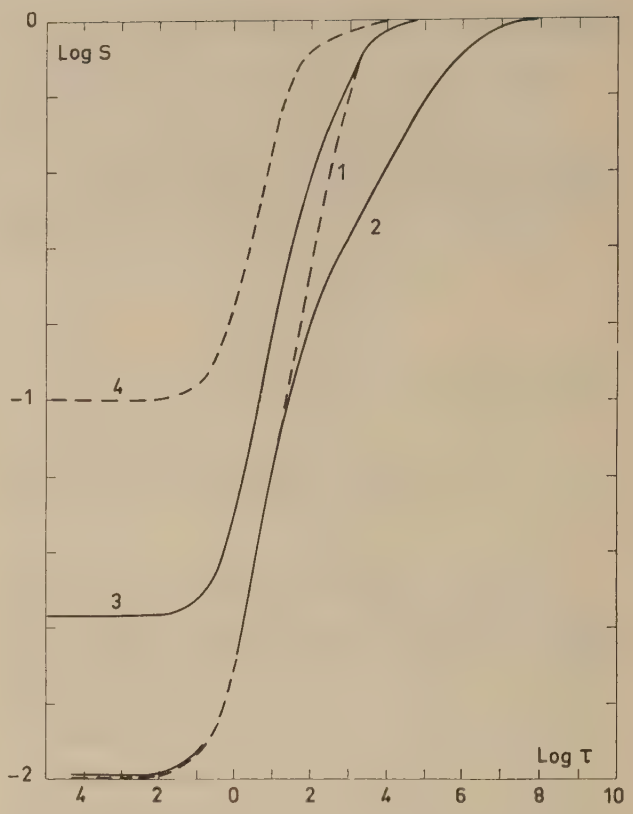

FIG. 3. — Fonction source en fonction de la profondeur optique au centre de la raie.

Profil Doppler
1) $N = D = 10^{-4}$ $r = 0$
Profil de Voigt $a = 10^{-2}$
2) $N = D = 10^{-4}$ $r = 0$.
3) $N = D = 10^{-4}$ $r = 10^{-4}$.
4) $N = D = 10^{-2}$ $r = 0$.

L'intégrale sur les fréquences est calculée de la façon suivante : l'intervalle de fréquences à représenter est partagé en une séries d'intervalles finis correspondant chacun à une variation du profil d'absorption d'un facteur 10. Les valeurs de x limitant les intervalles successifs sont donc :

0 1,4 2,1 2,8 6,3 20 63 200 630 etc.

Dans chaque intervalle, l'intégration numérique est effectuée à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Legendre à un point.

Les calculs ont été exécutés pour des domaines de fréquence correspondants aux valeurs de x suivantes

20, 63, 200, 630, 2000, 6300,

avec des formules de quadrature ayant donc un nombre de points variant de 5 à 10.

L'étude de la non-microréversibilité éclaire bien

les résultats obtenus qui sont portés sur les figures 4 et 5.

Pour les valeurs des paramètres choisis :

(204) $$x_l = 24,$$
$$\tau_l = 10^5.$$

La profondeur optique au centre de la raie à la profondeur optique moyenne τ_l est égale à 0,56 10^5.

Pratiquement la formule à 9 points s'étendant jusqu'à 2000 largeurs Doppler est suffisante. Elle correspond à un facteur K voisin de 100.

La formule de quadrature à un point dans chaque intervalle étant peu précise, nous avons effectué le calcul avec la même suite d'intervalles, pour une largeur de profil égale à 2000 largeurs Doppler, avec la formule de Gauss-Legendre à deux points, ce qui donne une formule de quadrature à dix-huits points sur le demi-profil. L'écart maximal entre les deux solutions, qui est situé à la profondeur optique de 1000, est de 6/100.

Il est aisé de contrôler que la non-microréversibilité est due essentiellement à la dimension semi-infinie du milieu. La fonction source est égale à 0,5 à la profondeur τ_l et atteint sa valeur limite 1/100 près à une profondeur de l'ordre de grandeur de 10^9.

Nous avons considéré le cas également où l'absorption continue est non négligeable :

(205) $$r = 10^{-4},$$
$$Sc = 1.$$

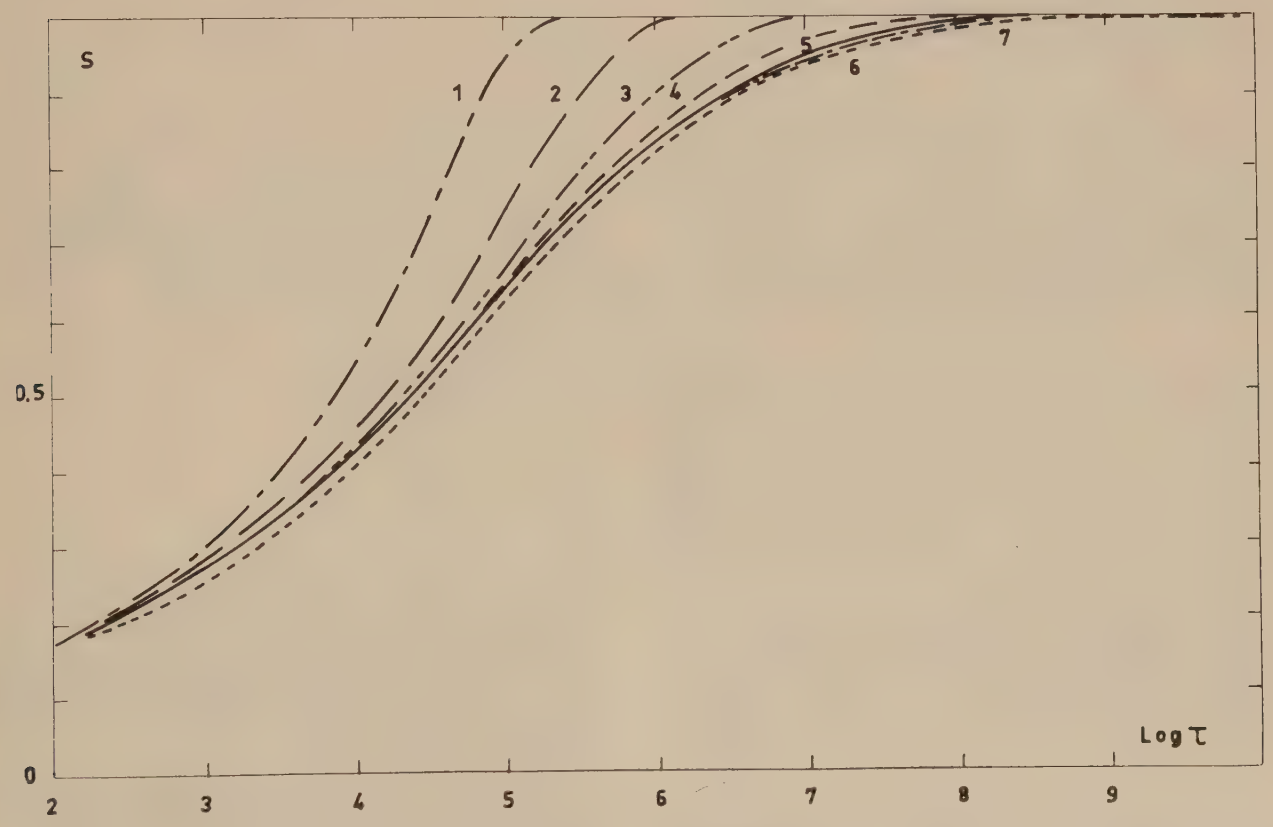

FIG. 4. — Influence des ailes du profil d'absorption sur la fonction source aux grandes profondeurs optiques. Profil de Voigt ($a = 10^{-2}$)

	x_L	COURBE	NOMBRE DE POINTS DE LA FORMULE DE QUADRATURE
— — — — — — — —	20	1	5
— — — — — — — —	63	2	6
— — — — — — — —	200	3	7
— — — — — — — —	630	4	8
————————	2000	5	9
— — — — — — — —	6300	6	10
— — — — — — — —	2000	7	18

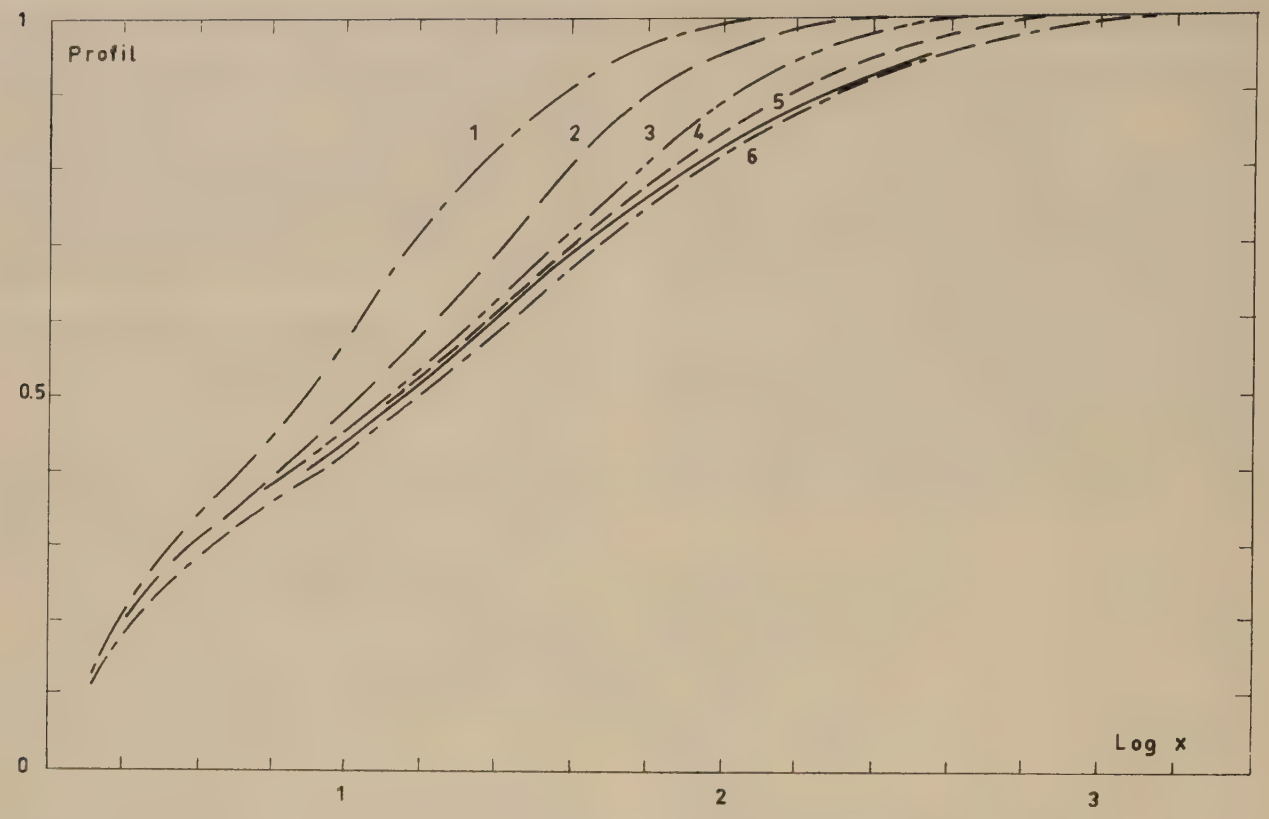

FIG. 5. — Influence des ailes du profil d'absorption sur le profil calculé aux grandes profondeurs optiques.
Profil de Voigt ($a = 10^{-2}$)

	x_M	COURBE	NOMBRE DE POINTS DE LA FORMULE DE QUADRATURE
— — — — — — —	20	1	5
— — — — — —	63	2	6
— — — — — — —	200	3	7
— — — — — — —	630	4	8
———————	2000	5	9
— — — — — — —	2000	6	18

r étant égal à D, l'absorption continue a une influence notable sur la solution.

La non-microréversibilité due à la présence du continu est négative :

$$\left(1 - \frac{S_c}{S_{jk}}\right) < 0. \tag{206}$$

La solution S_{jk} obtenue est donc supérieure à celle obtenue en l'absence du continu.

La fonction source atteint sa valeur limite à une profondeur de l'ordre de grandeur de 10^5.

Nous avons exécuté les calculs avec les mêmes formules de quadrature que dans le cas précédent : une formule de quadrature à six points sur le demi-profil, c'est-à-dire représentant un domaine de fréquences correspondant à 63 largeurs Doppler, donne la solution avec une précision de 1/100.

La figure 3 met en évidence l'influence du profil et de l'absorption continue sur la fonction source. On a porté sur cette figure, en plus des cas signalés, la fonction source pour un profil de Voigt et une valeur de D égale à 10^{-2}.

L'étude de la non-microréversibilité d'une transition liée-libre montrera le rôle important que peut jouer la courbure de la fonction source.

7) *Transition liée-libre. Étude de la non-microréversibilité.*

Cette étude est intéressante surtout pour le rayonnement continu de Lyman ; l'absorption continue de Balmer est alors négligeable.

$$\begin{cases} S = S_{j\nu}, \\ j = 1. \end{cases} \tag{207}$$

Nous supposons la fonction source indépendante de la profondeur pour calculer la non-microréversibilité due à la dimension semi-infinie du milieu.

$$(208)\quad \Delta'' = \int_{\nu_j}^{\infty} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \frac{\alpha_\nu}{4\pi}\left[\int_{4\pi}\left(1-\frac{I_\nu}{S_{j\nu}}\right)d\omega\right]d\nu,$$

$$= \int_{\nu_j}^{\infty} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e)\, k_\nu \frac{1}{h\nu} 2\pi E_2(\tau_\nu)\, d\nu.$$

On pose :

$$(209)\quad k_\nu = \frac{k_\nu}{\nu^3},$$

$$(210)\quad x = \frac{\nu}{\nu_j} \qquad x \geqslant 1.$$

$$(211)\quad \Delta'' = \frac{4\pi}{c^2} k_j \int_1^{\infty} \frac{1}{x} \exp\left(-\frac{h\nu_j}{kT_e}\right) E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right) dx.$$

τ désigne la profondeur optique à la longueur d'onde de 912 Å.

Posons :

$$(212)\quad f(x) = \frac{1}{x} \exp(-Ax)\, E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right).$$

où :

$$(213)\quad A = \frac{h\nu_j}{kT_e}.$$

La fonction $f(x)$ présente un maximum si $f'(x)$ s'annule pour une valeur de x supérieure à l'unité.

$$f'(x) = \frac{1}{x} \exp(-Ax)$$

$$(214)\quad \left[-\left(A+\frac{1}{x}\right) E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right) + \frac{3\tau}{x^4} E_1\left(\frac{\tau}{x^3}\right)\right],$$

d'où l'équation :

$$(215)\quad \left(A+\frac{1}{x}\right) E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right) = \frac{3\tau}{x^4} E_1\left(\frac{\tau}{x^3}\right),$$

soit :

$$(216)\quad x^4 = \frac{3\tau}{A+\frac{1}{x}} \frac{E_1\left(\frac{\tau}{x^3}\right)}{E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right)},$$

Il est aisé d'évaluer la solution de cette équation

$$(217)\quad \frac{E_1\left(\frac{\tau}{x^3}\right)}{E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right)} = 1{,}48, \quad \text{si} \quad \frac{\tau}{x^3} = 1.$$

$$(218)\quad \frac{E_1\left(\frac{\tau}{x^3}\right)}{E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right)} \text{ tend vers 1, lorsque } \frac{\tau}{x^3} \text{ croît.}$$

La solution est approximativement égale à :

$$(219)\quad x_M = \sqrt[4]{\frac{3\tau}{A}}.$$

Les valeurs numériques de l'exemple traité sont :

$$j = 1, \quad Te = 10^4\ ^oK, \quad A = 15{,}8, \quad \frac{1}{x} < 1,$$

d'où :

$$x_M > 1, \quad \text{si :} \quad \tau > \tau_1 = 5{,}3.$$

La valeur de x_M varie lentement avec la profondeur optique.

Lorsque x croît ($x > x_M$) la fonction $f(x)$, dont la variation dépend essentiellement de celle de :

$$\exp(-Ax)\, E_2\left(\frac{\tau}{x^3}\right),$$

diminue très rapidement. L'intervalle utile d'intégration pour la variable x est petit.

Lorsque τ croît, tout en restant de l'ordre de quelques unités, la quantité Δ'' qui dépend très fortement de la valeur de la fonction $E_2(\tau/x^3)$ décroît très rapidement. La figure 6 donne les valeurs de Δ'' et de x_M en fonction de τ.

La non-microréversibilité due à la dimension semi-infinie du milieu devient infiniment petite pour des valeurs de τ de l'ordre de quelques dizaines d'unités : l'effet de courbure ne peut être alors négligé, et est même la principale cause de la non-microréversibilité des processus radiatifs.

L'exemple suivant illustre cet effet.

Il s'agit du transfert du rayonnement continu de Lyman dans un milieu plan parallèle semi-infini à température et à pression constantes :

$$Te = 10^4\ ^oK.$$

$$N = 10^{12} \text{ particules par cm}^3.$$

L'atome d'hydrogène n'a qu'un seul niveau.

$$N' = D' = 0{,}38\ 10^{-3}\ g_1 \exp(W_1/kT_e),$$

$$n = d = 0{,}38\ 10^{-3}.$$

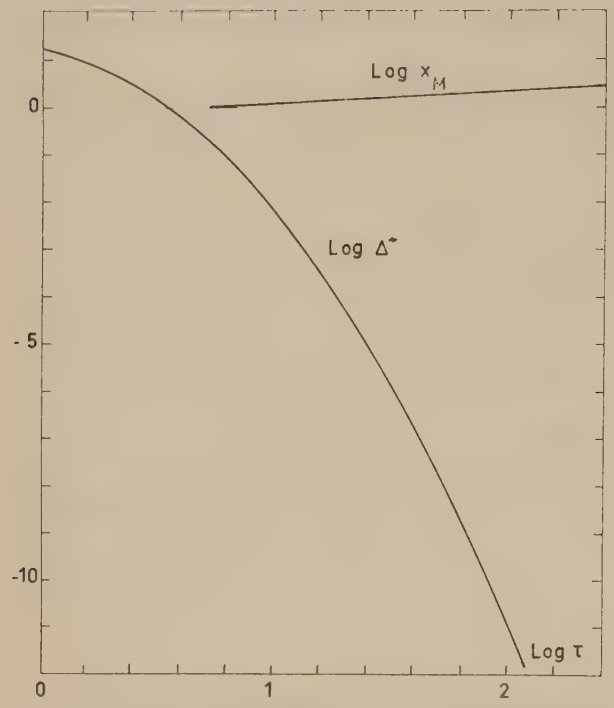

FIG. 6. — Non-microréversibilité des processus radiatifs d'une transition liée-libre due à la dimension semi-infinie du milieu.

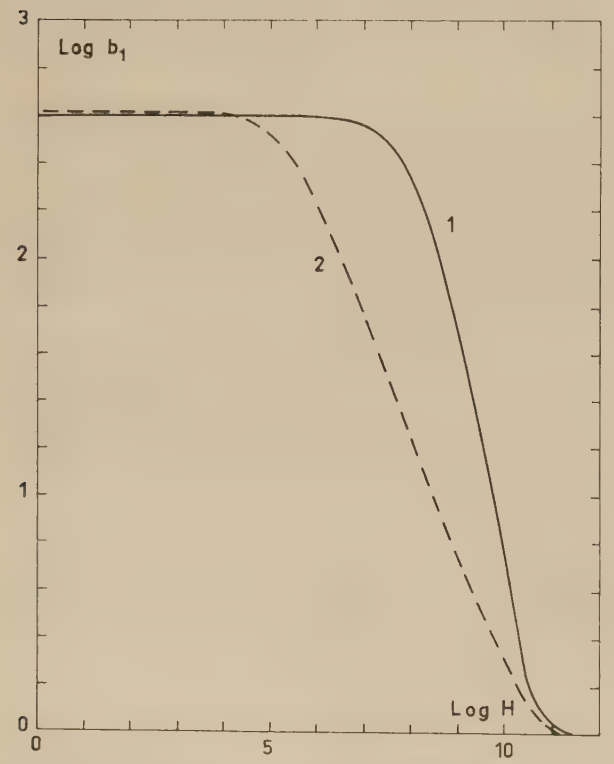

FIG. 7. — Atome à un niveau. Coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local.
1. Solution obtenue à la première itération (discutée au chapitre IV).
2. Solution obtenue en fin d'itérations (chap. VI).

L'origine de ces valeurs sera expliquée dans le dernier chapitre.

Nous avons résolu les équations de transfert et calculé la valeur de b_1 :

$$b_1 = \frac{R_1' + d}{P_1' + n} = \frac{d + \Delta''}{n},$$

$$\frac{R_1'}{R_1} = \frac{P_1'}{P_1} = \frac{\exp(-W_1/kTe)}{g_1}.$$

D'après la figure 6 la quantité Δ'' (211)est égale à 10^{-2} à une profondeur optique voisine de 30 ; à cette profondeur la solution du problème du transfert donne une valeur de b_1, voisine de 9 :

Δ'' est alors égal à :

$$nb_1 - d = 8 \times 0{,}38\ 10^{-3},$$

et est donc très supérieur à d.

La figure 7 donne la variation de b_1 en fonction de la profondeur géométrique. Il y a micro-réversibilité des processus radiatifs à une profondeur optique de l'ordre de grandeur de 1500.

Il est possible d'évaluer l'ordre de grandeur de la non-microréversibilité due à la courbure de la fonction source.

La fonction source, si l'on ne tient pas compte de l'émission induite, a pour expression :

$$(223) \qquad S_{j\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e)\,\frac{1}{b_1}.$$

Admettons que $1/b_1$ puisse être représenté localement par une parabole :

$$(224) \qquad \frac{1}{b_1} = a' + b'\tau + c'\tau^2,$$

où τ désigne la profondeur optique à la longueur d'onde de 912 Å.

$$(225) \qquad T(x, \mu) = \frac{\tau(x)}{\mu} = \frac{\tau}{\mu x^3},$$

$$(226) \qquad \frac{1}{b_1} = a' + b'\mu x^3\, T + c'\mu^2 x^6\, T^2,$$

$$= a'' + b''\, T + c''\, T^2.$$

A l'aide des équations (126) et (127) en supposant l'intervalle d'intégration infini, on peut évaluer la non-microréversibilité due à la courbure de la fonction source.

$$(227) \qquad 1 - \frac{y(\mu, x)}{S_{jx}} = -2c''\, b_1,$$

$$(228) \qquad \int_0^{\pi/2} 2c'' b_1\, 2\pi \sin\theta\, d\theta = 2\pi \frac{2c' x^6}{3}\, b_1.$$

En portant cette valeur dans l'expression de Δ'' on obtient :

$$(229)\quad \Delta'' = -\frac{8\pi k_j}{c^2}\int_1^\infty \frac{1}{x}\exp(-Ax)\left(\frac{2c'x^6}{3}\right)dx,$$

$$\simeq -\frac{8\pi k_j}{c^2}\,\frac{2c'b_1}{3}\,\frac{e^{-A}}{A}\left(1+\frac{5}{A}+\frac{20}{A^2}\right).$$

On peut calculer c' en faisant passer une parabole par trois points successifs de la courbe représentant $1/b_1$; les points sont ceux utilisés pour l'intégration numérique des équations de transfert ; la valeur de c' est donc représentative de la courbure locale.

Le calcul de c' a été effectué aux profondeurs optiques de 36,6 et 580 à la longueur d'onde de 912 Å.

a)

τ	b_1
23,1	12,50
36,6	8,18
58	5,39

De ces valeurs on déduit :

$$(230)\quad -2c'b_1 = 0{,}75\ 10^{-4},$$

$$(231)\quad \Delta'' = 0{,}25\ 10^{-2}.$$

Si on utilise cette valeur de Δ'', due à la coubure, pour calculer b_1 à la profondeur de 36,6, on obtient :

$$(232)\quad b_1 = \frac{d+\Delta''}{n},$$

$$= 7{,}6,$$

valeur peu différente de celle donnée par la résolution des équations de transfert.

b) A la profondeur optique de 580 on effectue les mêmes calculs.

τ	b_1
366	1,37
580	1,14
917	1,04

$$(233)\quad \begin{cases} -2c'b_1 = 0{,}16\ 10^{-5}, \\ \Delta'' = 0{,}52\ 10^{-4}, \end{cases}$$

$$(234)\quad b_1 = 1{,}13.$$

La non-microréversibilité est donc bien expliquée par la courbure de la fonction source.

8) *Conclusion.*

Afin d'étudier la fonction source aux grandes profondeurs ainsi que la largeur utile des profils d'émission et d'absorption nous avons établi la relation entre la fonction source d'une transition et le bilan des processus radiatifs.

La non-microréversibilité des processus radiatifs peut être expliquée par différents effets.

S'il y a microréversibilité des processus radiatifs l'intensité moyenne est égale à la fonction source de la transition. Or, par suite de la discontinuité du milieu, l'intensité du rayonnement se propageant vers l'intérieur, aux faibles profondeurs optiques, a une valeur inférieure à la fonction source. Dans des cas simples, par exemple lorsque la fonction source est constante, il est facile de calculer ce défaut de rayonnement et le bilan des processus radiatifs. Nous avons appelé cet effet « la non-microréversibilité due à la dimension semi-infinie du milieu ». L'étude faite a mis en évidence le rôle important des ailes des profils d'absorption et d'émission.

La non-microréversibilité des processus radiatifs peut être expliquée par une courbure importante de la fonction source. C'est le cas du continu de Lyman, pour un atome à un seul niveau, dans un milieu de température électronique constante. On peut également avoir un effet de courbure important dans un milieu tel que la chromosphère solaire qui présente une remontée très rapide de la température électronique.

Enfin à une fréquence donnée divers absorbants peuvent intervenir pour lesquels les rapports des coefficients d'émission et d'absorption sont différents : la non-microréversibilité des processus radiatifs d'une transition liée-liée peut être sensible à la présence d'un absorbant continu.

V. Procédés itératifs.

1) *Détermination numérique des fonctions figurant dans les équations de transfert du rayonnement.*

Nous devons connaître, pour résoudre les équations de transfert, les valeurs numériques de l'absorption et de l'émission continues, de l'absorption dans la transition et des paramètres de la fonction source, à chaque profondeur.

a) *Absorption et émission.* — L'absorption et l'émission dépendent des populations. Nous supposons connue pour les divers champs de rayonnement des transitions de l'atome, y comprises celles pour lesquelles nous voulons calculer le transfert du rayonnement, une approximation. Il est donc possible de résoudre les équations d'équilibre statistique et de calculer ensuite les populations et les divers coefficients d'absorption et d'émission.

b) *Paramètres de la fonction source.* — Considérons par exemple le transfert du rayonnement pour l'ensemble des transitions de niveau inférieur j.

La fonction source de la transition jk est :

$$(235)\qquad S_{jk\nu} = \frac{\int_0^\infty J_\nu\,\varphi_\nu\,d\nu + \sum_{k'} L_{jkk'}\,P_{jk'} + L_{jkc}\,P_j + L_{jk}}{\left(1 + D'' + \frac{c_2}{2h\nu^3}\int_0^\infty J_\nu\,\psi_\nu\,d\nu\right)\left(1 - \frac{b_k}{b_j}\frac{\psi_\nu}{\varphi_\nu}\exp\left(-h\nu/kTe\right)\right)}\frac{j_\nu}{\varphi_\nu},$$

où :

$$k' > j,$$
$$k' \neq k.$$

Nous poserons :

$$D^o = D'' + \frac{c^2}{2h^3}\int_0^\infty J_\nu\,\psi_\nu\,d\nu.$$

Rappelons que les paramètres $L_{jkk'}$, L_{jkc}, L_{jk} et D^0_{jk} proviennent de l'expression de b_k/b_j obtenue à partir des coefficients des équations d'équilibre statistique :

$$(236)\qquad \frac{b_k}{b_j}\frac{2h\nu^3}{c^2}\exp\left(-h\nu/kT_e\right) = \int_0^\infty \frac{J_\nu\,\varphi_\nu\,d\nu + \sum_{k'} L_{jkk'}\,P_{jk'} + L_{jkc}\,P_j + L_{jk}}{1 + D^0_{jk}}.$$

Les coefficients $L_{jkk'}$, L_{jkc}, L_{jk} et D^0_{jk}, sont fonction des termes de rayonnement de toutes les transitions de niveau inférieur différent de j, et des termes d'émission induite des transitions de niveau inférieur j : on utilisera pour les calculer, l'approximation connue pour les intensités du rayonnement.

Pour déterminer les divers paramètres on utilise l'équation (236). On résout les équations d'équilibre statistique pour diverses valeurs des termes de rayonnement P_j, P_{jk}, $P_{jk'}$ et Rs_{kj}.

Les valeurs numériques de b_k et b_j sont portées dans l'équation (236). On obtient ainsi un système d'équations dont les inconnues sont les paramètres à déterminer.

Nous désignons par a la valeur numérique du premier membre de l'équation (236) :

$$(237)\qquad a = \frac{b_k}{b_j}\frac{2h\nu^3}{c^2}\exp\left(-h\nu/kT_e\right).$$

On peut former le système d'équations de la façon suivante :

$$\begin{cases} P_{jk'} = 0 \\ P_j = 0 \\ Rs_{kj} = 0 \end{cases} \qquad a = \frac{L_{jk}}{D^0_{jk}},$$

$$\begin{cases} P_{jk'} = 0 \\ P_j = 0 \\ Rs_{jk} = A_{kj}\,g_k \exp\left(\frac{W_k}{kT_e}\right)\varepsilon \end{cases} \qquad a' = \frac{L_{jk}}{\varepsilon + D^0_{jk}},$$

$$\begin{cases} P_{jk'} = 0 \\ P_j = \varepsilon \\ Rs_{kj} = 0 \end{cases} \qquad a_c = \frac{L_{jk} + L_{jkc}\,\varepsilon}{D^0_{jk}},$$

$$\begin{cases} k' \neq k \\ k' \geqslant j+1 \\ P_{jk'} = \varepsilon \\ P_j = 0 \\ Rs_{kj} = 0 \end{cases} \qquad a_{k''} = \frac{L_{jk} + L_{jkk''}\,\varepsilon}{D^0_{jk}}.$$

Rappelons que la constante 1 figurant au dénominateur de la fonction source, ou de l'expression de b_k/b_j, provient de la division du numérateur et du dénominateur par le terme de désexcitation spontanée : d'où les expressions des diverses valeurs de a en fonction de la valeur choisie pour le terme de désexcitation spontanée.

C'est l'ordre de grandeur de D^0_{jk} qui conduit à faire varier le terme de désexcitation spontanée Rs_{kj}. Pour déterminer L_{kj} et D^0_{jk}, on choisit une valeur de ε voisine de D^0_{jk}. Pour déterminer les autres paramètres on choisit également ε le plus judicieusement possible.

On opère ainsi pour toutes les transitions liées-liées jk.

Pour la transition liée-libre, on utilise une méthode analogue.

Si l'on ne traite qu'une seule transition, il suffit de déterminer D^o et N :

$$(238)\qquad \frac{b_k}{b_j}\frac{2h\nu^3}{c^2}\exp\left(-h\nu/kT_e\right) = \frac{\int_0^\infty J_\nu\,\varphi_\nu\,d\nu + N}{1 + D^0},$$

Il reste à calculer les termes :

$$\frac{1}{b_j}\exp\left(-h\nu/kT_e\right) \text{ ou } \frac{b_k}{b_j}\exp\left(-h\nu/kT_e\right).$$

figurant au dénominateur des fonctions source.

Ces termes provenant de l'expression de l'émis-

sion induite dans la transition sont petits. On utilise la solution obtenue pour b_j et b_k à l'aide de l'approximation utilisée pour les champs de rayonnement.

2) *Procédés itératifs.*

En résumé le calcul des intensités du rayonnement dans une transition, ou un ensemble de transitions de même niveau inférieur, comporte les trois parties de calcul numérique suivantes :

a) la détermination de l'absorption dans la transition et de l'absorption et de l'émission continues ;

b) la détermination des paramètres de la fonction source ;

c) l'intégration des équations de transfert.

Les deux premières parties nécessitant la connaissance des intensités du rayonnement dans les différentes transitions de l'atome, et la résolution des équations du transfert n'étant possible que pour des transitions de même niveau inférieur, on utilise comme nous l'avons déjà dit, un procédé itératif :

— lorsqu'on a résolu les équations de transfert du rayonnement pour une transition, ou un ensemble de transitions de même niveau inférieur, on utilise pour la suite des calculs les résultats obtenus pour les intensités de rayonnement ;

— une itération comporte le calcul des intensités du rayonnement pour les différentes transitions de l'atome.

Comme approximation initiale nous utiliserons celle donnée par l'hypothèse de la microréversibilité de toutes les transitions dont nous devons déterminer les intensités de rayonnement. Cette approximation est exacte aux grandes profondeurs.

L'intégration numérique des équations de transfert n'étant exécutée que sur un intervalle fini de profondeur, variable avec la transition, il est nécessaire d'extrapoler la solution :

$$\tau_{\text{MIN}} < \tau < \tau_{\text{MAX}},$$

$$\tau_{\text{MIN}} \simeq 10^{-3},$$

$$\tau_{\text{MAX}} \simeq \tau_{\text{L}}.$$

a) $\tau < \tau_{\text{MIN}}$.

L'atmosphère étant transparente pour la transition considérée les intensités du rayonnement sont constantes. Il est donc très facile d'extrapoler la solution. Si l'on utilise la forme Δ des équations d'équilibre statistique pour la transition traitée, il faut évidemment déterminer N et D à toutes les profondeurs pour calculer Δ.

b) $\tau > \tau_{\text{MAX}}$.

Le cas où la solution doit être prolongée au-delà de τ_{MAX} se présente pour la série de Lyman pour laquelle on peut alors admettre qu'il y a microréversibilité des processus radiatifs. Si l'on utilise la forme des équations d'équilibre statistique où figurent les trois termes de rayonnement et que l'on appellera dorénavant la forme I, on résout les équations d'équilibre statistique avec pour les transitions considérées, l'hypothèse de la microrésersibilité et à l'aide de la solution obtenue pour les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local, on calcule J :

$$J_\nu = S_\nu,$$

où S_ν est donné suivant le cas par la formule (58) ou la formule (59). Si on utilise la forme Δ qui sera appelée la forme II des équations d'équilibre statistique, l'extrapolation est simple :

$$\Delta = 0.$$

3) Nous allons préciser maintenant les avantages et les inconvénients des différents procédés itératifs.

a) Calcul des intensités de rayonnement transition par transition.

Il est alors possible d'utiliser les deux formes décrites pour les équations d'équilibre statistique. Les paramètres N et D d'une transition jk auront des valeurs différentes N_I, D_I ou N_{II} et D_{II} suivant la forme des équations utilisées pour les autres transitions. N_I est en particulier une fonction linéaire des termes de photoexcitation $P_{jk'}$ du niveau j, D_I est indépendant de ces termes. Les termes $\Delta_{k'j}$ figurent dans les expressions de N_{II} et D_{II}.

Les fonctions N_I, D_I, N_{II} et D_{II} ne sont pas indépendantes. En particulier en fin d'itérations de l'une et l'autre méthode, les relations entre N_I, D_I, N_{II} et D_{II} pour une transition donnée jk sont telles que la solution des équations de transfert P_{jk} soit la même. Mais les solutions intermédiaires et la rapidité de la convergence dépendent de la forme des équations d'équilibre statistique utilisée.

N_I dépend linéairement des termes de photoexcitation $P_{jk'}$; la solution P_{jk} dépend linéairement de N_I ; la convergence de ce procédé est très lente. La forme II des équations d'équilibre statistique qui fait jouer à la non-microréversibilité un rôle important donne une convergence assez rapide si elle n'est utilisée que pour les transitions liées-liées. Les essais ont montré que la convergence est la plus rapide avec la forme suivante des équations : forme I pour les transitions liées-libres et forme II pour les transitions liées-liées.

L'utilisation de la forme II pour les transitions liées-liées présente parfois certains inconvénients

Dans certains cas la fonction D de la fonction source d'une transition peut être négative et produire donc une instabilité numérique. Lorsque D est négatif dans les régions superficielles la méthode est stable dans les zones plus profondes, la stabilité semble un peu moins bonne.

Nous nous sommes heurtés, en utilisant cette méthode à une autre difficulté ; les solutions intermédiaires, en particulier les premières, peuvent être éloignées de la solution du problème et n'avoir aucun sens physique. Lors de la résolution des équations du transfert du rayonnement continu de Lyman (avec $D < 0$) avec un modèle de chromosphère solaire à fort gradient de température, nous avons obtenu des intensités de rayonnement et des populations négatives. Ce sont les inconvénients de cette méthode qui nous ont conduits à essayer la résolution simultanée du transfert du rayonnement des transitions de même niveau inférieur.

b) Résolution simultanée des équations du transfert du rayonnement pour les transitions de même niveau inférieur.

Cette méthode conduit à résoudre des systèmes d'équations différentielles d'ordre très élevé.

Il est donc possible d'utiliser deux procédés itératifs. Soit l'on résout simultanément les équations de transfert du rayonnement des transitions de même niveau inférieur : cette méthode conduit à résoudre des systèmes d'équations différentielles d'ordre élevé. Soit l'on traite séparément les différentes transitions mais en introduisant dans les équations d'équilibre statistique le bilan global des processus radiatifs des transitions liées-liées : dans certains cas cette méthode donne au cours des premières itérations des solutions n'ayant aucun sens physique.

Nous terminerons cet article par quelques applications qui nous permettront d'étudier le couplage entre les différentes transitions de l'atome.

VI. Application : Atome a plusieurs niveaux. Couplage entre les transitions.

Nous reprenons dans ce chapitre, comme exemple, un problème standard qui a été proposé aux divers groupes travaillant sur les problèmes de transfert à la conférence de Harvard-Smithsonian 1965.

1) *Caractéristiques de l'atmosphère et valeurs des paramètres physiques.*

Nous donnons les caractéristiques de l'atmosphère et les valeurs des paramètres physiques.

Géométrie : milieu plan parallèle semi-infini.

Composition chimique : hydrogène.

Température : 10^4 °K.

Densité totale : $N = 10^{12}$ particules par centimètre cube.

Probabilité d'Einstein : Menzel (1962). Profil Doppler.

Section de photoionisation de Allen (1955).

Excitations par collision :

$$(292)\quad C'_{jk} = \gamma_{jk}\, 5{,}463\, 10^{-11}\, N_e\, T_e^{1/2} \exp(-W_{jk}/kT_e).$$

ionisations par collision :

$$(293)\quad C'_{jc} = \gamma_j\, 5{,}463\, 10^{-11}\, N_e\, T_e^{1/2} \exp(-W_j/kT_e).$$

$$\gamma_1 = 1\,;\quad \gamma_2 = 8\,;\quad \gamma_3 = 27,$$

$$(294)\quad \gamma_{12} = 2{,}6\,;\quad \gamma_{13} = 0{,}67\,;\quad \gamma_{23} = 61,$$

L'intensité moyenne :

$$J = \sum_j b_j\, y(\mu_j),$$

est calculée (sauf indication contraire) à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Legendre à deux points, les termes P_{jk} d'excitation par le rayonnement des transitions entre niveaux discrets à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Hermite à 4 points, les termes de photoionisation et de recombinaison à l'aide de la formule de quadrature de Gauss-Legendre à 5 points.

L'intégration des termes du rayonnement continu de Lyman a été limitée à une longueur d'onde de 500 Å. Les termes du rayonnement continu de Balmer sont calculés avec une formule à cinq points entre 3646 Å et 912 Å, et une formule à 5 points entre 912 Å et 500 Å. On opère de même pour les autres niveaux.

Lorsqu'on résout le problème du transfert du rayonnement continu de Balmer, par exemple, on ne traite que l'intervalle de longueur d'onde de 3646 Å à 912 Å. Le terme situé dans le spectre continu de Lyman, est considéré comme un terme correctif, que l'on calcule à l'aide des valeurs des intensités obtenues au cours de l'itération précédente.

2) *Calcul de l'ionisation et des populations des niveaux.*

Nous allons préciser le calcul des populations et faire quelques remarques sur l'interprétation des coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local.

Les populations vérifient la loi de Boltzmann-Saha modifiée :

$$\frac{N_j}{N_p\, N_e} = \frac{1}{u_{II}} \frac{h^3}{2(2\pi m k T_e)^{3/2}}\, b_j\, g_j \exp(W_j/kT_e),$$

$$\frac{N_0}{N_p N_e} = \frac{1}{u_{II}} \frac{h^3}{2(2\pi m k T_e)^{3/2}} \sum_j b_j g_j \exp(W_j/kT_I),$$

$$= 1/c.$$

Nous imposons la condition :

$$N_0 + N_p + N_e = 10^{12}, \quad (295)$$

avec :

$$N_p = N_e, \quad (296)$$

d'où l'équation :

$$N_e^2 + 2cN_e - 10^{12} c = 0, \quad (297)$$

soit :

$$N_e = \sqrt{c^2 + 10^{12} c} - c. \quad (298)$$

N_e et N_p étant connus, il est possible de calculer N_j.

A l'équilibre thermodynamique, à la température de 10^4 °K, l'hydrogène est très ionisé :

$$\left(\frac{N_0}{N_p}\right)^* \simeq \left(\frac{N_1}{N_p}\right)^* = 1{,}47\ 10^{-3} = 1/(0{,}68\ 10^3), \quad (299)$$

si :

$$N_e = 0{,}5\ 10^{12}$$

On a approximativement :

$$N_0/N_e^2 = b_1 (N_0/N_e^2)^*. \quad (300)$$

Si b_1 est très inférieur à $0{,}68\ 10^3$, l'hydrogène reste intégralement ionisé :

$$N_j = b_j N_j^*, \quad (301)$$

où N_j^* est la population calculée à l'équilibre thermodynamique pour une densité totale de 10^{12} particules par centimètre cube.

Il y aura une modification importante du nombre de protons, par rapport à l'équilibre thermodynamique, si b_1 est voisin de $0{,}68\ 10^3$: la variation du rapport N_j/N_p est due en partie à la variation de N_j, en partie à la variation de N_p. Il faut alors effectuer le calcul des populations correctement comme il a été indiqué plus haut.

Cette analyse s'applique aux métaux de faible potentiel d'ionisation (inférieur à 7 V) dans la photosphère solaire. Les métaux sont entièrement ionisés ; la population des ions est imposée par la pression qui doit vérifier l'équilibre hydrostatique. Les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique donnent donc directement le rapport des populations des niveaux d'énergie de l'atome neutre aux populations données par l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local.

Par contre l'hydrogène dans la photosphère solaire est peu ionisé.

$$\left\{\begin{array}{ll} T_e & = 4500^{\circ}\ K \\ N_e & = 0{,}143\ 10^{13} \quad \text{(dus aux métaux).} \\ N_p^* & = 0{,}101\ 10^{10} \\ (N_p/N_0)^* & = 0.3\ 10^{-6} \\ b_1 & = 0{,}2. \end{array}\right. \quad (302)$$

La condition relative à la pression impose que la valeur de N_0 soit celle calculée avec l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local. Il y aura seulement $(1/b_1)$ fois plus de protons, ce qui ne modifiera en rien la densité électronique qui est due aux métaux. Les écarts à l'ionisation seront importants dans la chromosphère solaire et également dans les photosphères d'étoiles plus chaudes que le soleil où les électrons sont fournis par l'hydrogène.

3) *Solution des équations de transfert à paramètres constants dans les régions transparentes.*

Nous utiliserons pour interpréter les résultats, en particulier le couplage entre les transitions, une propriété démontrée par AVRETT et HUMMER [4] de la solution des équations de transfert. Lorsque les paramètres N et D sont constants, D étant très inférieur à l'unité, et lorsque l'absorption continue est négligeable, la fonction source à l'origine est égale à :

$$S = N/\sqrt{D}, \quad (si : \tau < \tau_{MIN}). \quad (304)$$

On obtient donc dans le cas d'une transition liée-liée :

$$\frac{b_k}{b_j} \frac{2h\nu^3}{c^2} \exp(-h\nu/kT_e) \simeq S, \quad (305)$$

$$\simeq \frac{N}{\sqrt{D}},$$

d'où :

$$\frac{b_k}{b_j} \simeq \frac{(N'/R_{kj})}{\sqrt{D'/R_{kj}}}. \quad (306)$$

On peut calculer la valeur de la non-microréversibilité radiative à la surface :

$$S = \frac{N}{\sqrt{D}} = \frac{N}{D + \delta},$$

d'où :

$$\delta = \sqrt{D} - D, \quad (307)$$

$$\simeq \sqrt{D},$$

si D est très inférieur à l'unité.

On obtient de même pour une transition liée-libre :

$$\frac{P_j}{R_j} \simeq \frac{1}{b_j} \simeq \frac{N'}{\sqrt{D'/R_j}}. \tag{308}$$

Nous allons examiner un certain nombre de cas différents par le nombre de niveaux et les transitions pour lesquelles le problème du transfert du rayonnement est résolu.

Nous donnerons chaque fois les résultats, ensuite nous les interpréterons ; puis nous indiquerons le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence.

Avant de passer à l'étude des cas traités, nous donnons quelques valeurs numériques que nous utiliserons pour interpréter les résultats.

Collisions. ($N_e = 0{,}5\ 10^{12}$)

$$C_1 = 0.53\ 10^4,$$
$$C_2 = 0.17\ 10^6,$$
$$C_{12} = 0.745\ 10^6.$$

Rayonnement.

$$R_1 = 0.935\ 10^9,$$
$$R_2 = 0.31\ 10^9,$$
$$A_{21} = 4.7\ 10^8.$$

$$\exp(W_1/kT_e) = \exp(x_1) = 0.71\ 10^7,$$
$$\exp(W_2/kT_e) = \exp(x_2) = 0.52\ 10^2,$$
$$\exp(x_{12}) = \exp(x_1)/\exp(x_2).$$

4) *Atome à un niveau.*

a) La figure 7 donne la variation de b_1 en fonction de l'altitude. Ce cas a été discuté lors de l'étude de la non-microréversibilité d'une transition liée-libre. Nous avons vu que dans les régions profondes, la non-microréversibilité était due essentiellement à la courbure.

b) Interprétation.

L'atome peut être ionisé soit par les chocs électroniques, soit par le rayonnement. L'équation d'équilibre statistique est :

$$b_1 (C_1 + P_1) = R_1 + C_1, \tag{309}$$

ou :

$$b_1 C_1 = \Delta_1 + C_1, \tag{310}$$

d'où l'on déduit :

$$N' = D' \simeq C_1,$$
$$D \simeq C_1 R s_1.$$

Nous avons vu lors de l'étude de la non-microréversibilité radiative le rôle du paramètre D'. Ce paramètre représente le nombre de recombinaisons collisionnelles. La fonction source atteint donc sa valeur limite aux grandes profondeurs lorsque la non-microréversibilité radiative devient négligeable par rapport aux autres processus réglant la population des niveaux, ici les collisions.

Thomas (1957) désigne par fonction source déterminée par les processus collisionnels ce type de fonction source dont les paramètres sont des termes de collision.

En utilisant la propriété indiquée de la solution des équations de transfert dans les régions transparentes, il est possible de retrouver le résultat.

L'émission induite est négligeable par rapport à l'ionisation par collisions.

$$\begin{cases} \dfrac{1}{b_1} \simeq \dfrac{P_1}{R s_1} \simeq \dfrac{C_1}{R s_1}\sqrt{\dfrac{R s_1}{C_1}}, \\ \qquad \simeq \sqrt{\dfrac{C_1}{R s_1}}, \\ \qquad \simeq 2.38\ 10^{-3}. \end{cases} \tag{311}$$

$$\begin{cases} b_1 \simeq \dfrac{R s_1}{P_1} \\ \qquad \simeq 420. \end{cases} \tag{312}$$

c) Étant donnée la valeur maximale de b_1, 420, il y aura une modification du nombre de protons et d'électrons, mais surtout une modification du nombre d'atomes neutres par rapport aux valeurs données par l'équilibre thermodynamique.

Au cours des itérations la profondeur optique varie notablement, tandis que les fonctions $N(h)$ et $D(h)$ varient peu.

Les solutions intermédiaires oscillent autour de la solution finale. C'est à une profondeur optique voisine de 150 que la convergence est la plus lente. Nous donnons à cette profondeur les valeurs de b_1 obtenues au cours des itérations successives dans le tableau III.

5) *Atome à deux niveaux.*

a) Nous avons traité divers cas qui diffèrent par les valeurs des termes de photoionisation. Nous avons traité le problème du transfert du rayonnement des transitions liées-libres ou adopté pour les termes de photoionisation les valeurs données par l'équilibre thermodynamique.

Cas I.

Les rayonnements continus sont supposés à l'équi-

TABLEAU III

Itérations	b_1
	1,000
1	8,180
2	1,028
3	6,519
4	1,220
5	4,108
6	1,707
7	2,853
8	2,149
9	2,462
10	2,319
11	2,379
12	2,355
13	2,362

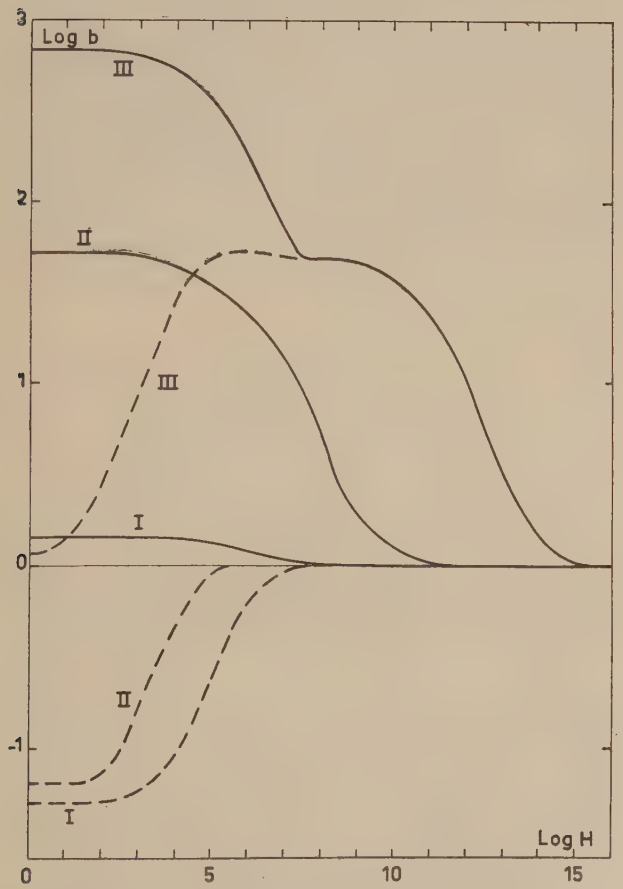

Fig. 8. — Atome à deux niveaux. Coefficients d'écart à l'E. T. L.

Cas I, II, III.

b_1 ———,

b_2 — — —.

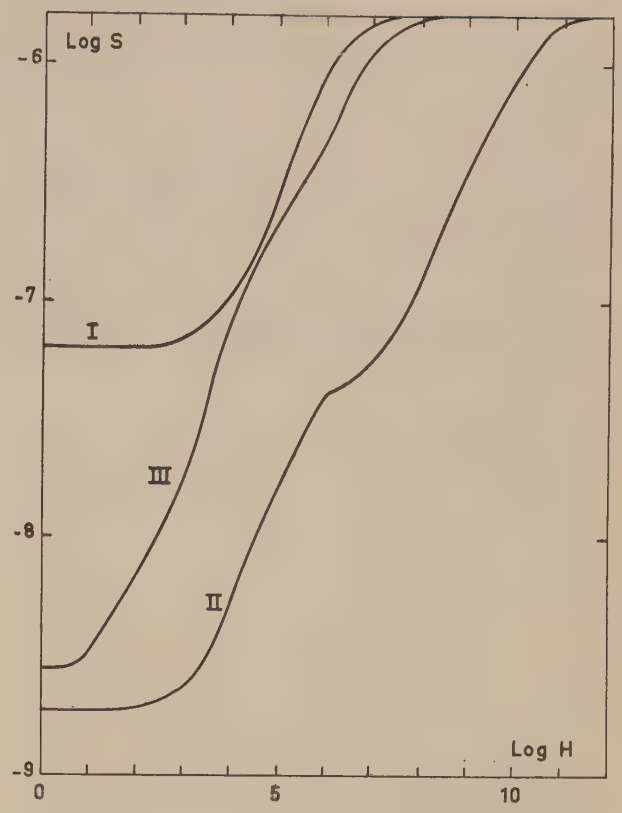

Fig. 9. — Atome à deux niveaux. Fonction source de Lyman α.

Cas I, II, III.

libre thermodynamique. On calcule les intensités du rayonnement dans Lyman α.

Cas II.

Seul le rayonnement continu de Balmer est supposé à l'équilibre thermodynamique. Dans ce cas l'intensité moyenne est calculée à l'aide de la formule de Gauss-Legendre à un point.

Cas III.

On calcule la solution exacte des équations de transfert pour les trois transitions de l'atome.

Les résultats sont donnés par les figures 8 et 9.

b) Nous allons étudier les différentes transitions de l'atome. Les expressions des fonctions N′ et D′ sont obtenues à partir de celles de b_1 et b_2 :

(313)

$$b_1 = \frac{R_1 + C_1 + (R_2 + C_2)\,\dfrac{C_{12} + R_{21}}{C_2 + P_2 + C_{12} + R_{21}}}{P_1 + C_1 + (C_{12} + P_{12}\,\dfrac{C_2 + P_2}{C_2 + P_2 + C_{12} + R_{21}}}$$

(314)

$$b_2 = \frac{R_2 + C_2 + (R_1 + C_1)\,\dfrac{C_{12} + P_{12}}{C_1 + P_1 + C_{12} + P_{12}}}{P_2 + C_2 + (C_{12} + R_{21})\,\dfrac{C_1 + P_1}{C_1 + P_1 + C_{12} + P_{12}}}$$

Les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique ont, si on utilise la forme II des équations d'équilibre statistique, des expressions différentes, que l'on obtient à partir de celles écrites ci-dessus, en supprimant les termes de photoexcitation et de photoionisation, et en substituant aux termes de désexcitation et de recombinaison le bilan Δ des processus radiatifs.

D'après l'étude faite sur la microréversibilité, pour interpréter les résultats obtenus pour un atome à deux niveaux, nous avons intérêt à considérer les transitions par ordre d'opacité croissante.

α) *Rayonnement continu de Balmer.*

Nous supposons qu'il y a microréversibilité des processus radiatifs des deux transitions de Lyman :

$$P_1 = R_1 = 0, \tag{315}$$

$$\Delta_{21} = 0, \tag{316}$$

$$b_2 = \frac{R_2 + C_2 + C_{12} + \dfrac{C_1}{C_1 + C_{12}}}{P_2 + C_2 + C_{12} + \dfrac{C_1}{C_1 + C_{12}}}. \tag{317}$$

En tenant compte de l'ordre de grandeur des différents termes on obtient :

$$N \simeq D \simeq \frac{C_2}{Rs_2} = 4{,}15\ 10^{-4}. \tag{318}$$

On est ramené au cas précédent d'un atome à un niveau.

Dans les régions transparentes, c'est-à-dire lorsque τ est inférieur à τ_{min} (10^{-2}) on a :

$$\frac{1}{b_2} \simeq \frac{P_2}{Rs_2} \simeq \sqrt{\frac{C_2}{Rs_2}} = 2\ 10^{-2}. \tag{319}$$

β) *Rayonnement continu de Lyman.*

$$N' = C_1 + C_{12}\frac{C_2 + P_2}{C_2 + P_2 + C_{12} + \Delta_{21}}, \tag{320}$$

$$D' = C_1 + (C_{12} + \Delta_{21}) \frac{C_2 + R_2}{C_2 + P_2 + C_{12} + \Delta_{21}}. \tag{321}$$

Faisons l'hypothèse de la microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α :

$$\Delta_{21} = 0,$$

Étant donné l'ordre de grandeur des termes on obtient :

$$N' \simeq C_{12}, \tag{322}$$

$$D' \simeq C_{12}\frac{R_2}{P_2}. \tag{323}$$

La population du niveau fondamental, avec l'hypothèse de la microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α, dépend donc des processus collisionnels C_{12}, des processus radiatifs du continu de Balmer et évidemment des processus radiatifs du continu de Lyman.

Nous ferons ici une remarque sur les fonctions N′ et D′ du continu de Lyman. S'il n'y a pas microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α, on obtient :

$$N' \simeq C_{12}\frac{P_2}{P_2 + C_{12} + \Delta_{21}}, \tag{324}$$

$$D' \simeq (C_{12} + \Delta_{21})\frac{R_2}{P_2 + C_{12} + \Delta_{21}}. \tag{325}$$

Lorsque Δ_{21} est négatif, supérieur en valeur absolue à C_{12} mais inférieur à P_2, D′ est négatif. Nous avons rencontré ce cas dans la chromosphère solaire : les solutions intermédiaires obtenues au cours des itérations avec la forme Δ des équations d'équilibre statistique n'ont alors aucun sens physique.

Avec l'hypothèse de la microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α, il est possible d'évaluer la valeur de b_1 aux profondeurs où le continu de Lyman est transparent.

Les résultats dépendent de la valeur adoptée pour P_2.

— $P_2 = R_2$.

$$N' = D' = C_{12},$$

$$1/b_1 \simeq P_1/R_1 \simeq \sqrt{C_{12}/R_1} = 1/35 ;$$

— $P_2/R_2 = 2\ 10^{-2}$.

$$N' \simeq C_{12},$$

$$D' \simeq C_{12}\,R_2/P_2,$$

$$1/b_1 \simeq P_1/Rs_1 \simeq \sqrt{(P_2\,C_{12})/(R_2\,Rs_1)} = 1/250.$$

γ) *Lyman α.*

Nous donnerons les expressions de N et D.

$$N = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{C_{12}\left(\dfrac{1}{R_1 + C_1} + \dfrac{1}{R_2 + C_2}\right) + \dfrac{P_1 + C_1}{R_1 + C_1}}{A_{21}\,g_2\,e^{x_1}\left(\dfrac{1}{R_1 + C_1} + \dfrac{1}{R_2 + C_2}\right)}. \tag{328}$$

$$(329)\qquad D = \frac{C_{12}\left(\frac{1}{R_1+C_1}+\frac{1}{R_2+C_2}\right)(e^{\alpha_{12}}-1)+\frac{C_2+P_2}{C_2+R_2}e^{\alpha_{12}}-\frac{C_1+P_1}{C_1+R_1}}{A_{21}\,g_2\,e^{\alpha_1}\left(\frac{1}{R_1+C_1}+\frac{1}{R_2+C_2}\right)}.$$

En tenant compte de l'ordre de grandeur des différents termes on obtient :

$$(330)\qquad N \simeq \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{A_{21}\,g_2\,e^{\alpha_1}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)}\frac{P_1}{R_1}$$

$$= 0{,}236\ 10^{-8}\frac{P_1}{R_1},$$

$$(331)\qquad D \simeq \frac{e^{\alpha_{12}}}{A_{21}\,g_2\,e^{\alpha_1}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right)}\frac{P_2}{R_2}$$

$$= 0{,}147\ 10^{-2}\frac{P_2}{R_2}.$$

La fonction source de Lyman α dépend des valeurs des termes de photoionisation P_1 et P_2.

On peut interpréter les résultats, comme précédemment, en supposant que P_1 et P_2 sont constants aux profondeurs où l'on résout les équations de transfert du rayonnement dans Lyman α.

δ_{21}, dans les régions superficielles, est donné par l'équation (307). Δ_{21} étant de l'ordre de grandeur de 10^9 ou 10^{10}, on obtient dans tous les cas :

$$b_1 \simeq \frac{R_1+R_2}{P_1},$$

$$b_2 \simeq \frac{R_2}{\Delta_{21}}.$$

En supposant que toutes les transitions sont découpées on peut calculer P_1, P_2, δ_{21} à l'aide des équations (307) et (308) et comparer les valeurs de b_1 et b_2 obtenues à la surface à celles données par la solution exacte du problème du transfert. Les différentes valeurs sont données dans le tableau IV.

L'accord entre les deux séries de résultats, aux profondeurs où toutes les transitions sont transparentes, est excellent dans les deux premiers cas, moins bon dans le troisième. Dans le cas I l'accord est obligatoire puisque l'on ne calcule le transfert du rayonnement que pour une transition, Lyman α.

Essayons de comprendre ce qui différencie les deux autres cas. L'évaluation des coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique suppose qu'aux profondeurs où l'on résout les équations de transfert d'une transition ; c'est-à-dire entre la zone de microréversibilité et la zone de transparence, toutes les autres transitions sont ou optiquement épaisses, ou transparentes.

L'étude des profondeurs optiques montre que ceci est vérifié pour le continu de Balmer. La valeur de P_2 obtenue avec calcul du transfert du rayonnement des trois transitions de l'atome est égale à celle obtenue avec l'hypothèse de la microréversibilité des transitions de Lyman :

$$P_2/R_2 = 1/50.$$

Si les deux transitions de Lyman sont découplées dans le cas II elles ne le sont plus dans le cas III. La constante D de Lyman α, étant proportionnelle à P_2, est cinquante fois plus petite dans le cas III. La non-microréversibilité de Lyman α joue un rôle d'autant plus important que P_2 est plus petit.

D'après les résultats des intégrations numériques, dans le cas II, la non-microréversibilité de Lyman α, δ, est égale à D/100 à une profondeur optique au centre de la raie voisine de 1500, qui correspond à une profondeur optique du continu de Lyman égale environ à 0,2 à 912 Å ; dans le cas III les profondeurs optiques correspondantes sont respectivement proches de $5\ 10^4$ et 7 : les équations de transfert des deux transitions sont donc couplées.

Nous ferons ici une remarque sur la formule de Gauss-Hermite à quatre points utilisée pour calculer le terme de rayonnement de Lyman α. D'après la figure 1, dans le cas III, la non-microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α est égale à D/100, c'est-à-dire à $0{,}337\ 10^{-6}$, à une profondeur égale à $2{,}5\ 10^5$. La formule de quadrature à quatre points, dont le point le plus éloigné du centre correspond à une valeur de φ de l'ordre de 10^{-4}, est donc un peu insuffisante dans le cas III : elle réduit le couplage entre les deux transitions de Lyman.

Les calculs ont été exécutés essentiellement pour étudier la détermination des coefficients d'écart à l'équilibre pour un atome à plusieurs niveaux : pour cette étude le nombre de points de la formule de quadrature est suffisant. Dans les applications dont les résultats doivent être confrontés avec les observations, il faut choisir très judicieusement les formules de quadrature.

c) Procédés itératifs. Convergence.

Cas I.

TABLEAU IV

Hypothèses	Valeurs approchées	b	Valeurs exactes	Hypothèses
$P_2 = R_2$	1,44	b_1	1,42	$P_2 = R_2$
$P_1 = R_1$	0,55 to^{-1}	b_2	0,55 10^{-1}	$P_1 = R_1$
$P_2 = R_2$	50,5	b_1	52,7	$P_2 = R_2$
$P_1 = R_1/35$	0,55 to^{-1}	b_2	0,62 10^{-1}	
$P_2 = R_2/50$	360	b_1	675	
$P_1 = R_1/250$	0,39	b_2	1,15	

La convergence est rapide : 4 itérations suffisent.

Cas II.

a) On calcule les intensités du rayonnement transition par transition avec la forme I des équations d'équilibre statistique pour les transitions liées-libres et la forme II pour les transitions liées-liées.

C'est aux profondeurs optiques moyennes que la convergence est la plus lente : les solutions intermédiaires oscillent autour de la solution finale. A la 6^e itération la convergence est atteinte à 1/100 près.

b) Résolution simultanée du transfert du rayonnement des transitions de Lyman.

Il y a convergence également à la 6^e itération.

Cas III.

a) La forme I des équations d'équilibre statistique pour les transitions liées-libres et la forme II pour les transitions liées-liées donnent la solution à la 10^e itération.

b) Les autres procédés, forme I ou forme II pour toutes les transitions, ne convergent pas.

Avec la forme I les coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local progressent lentement vers la solution : à la 40^e itération b_1 est égal à 104.

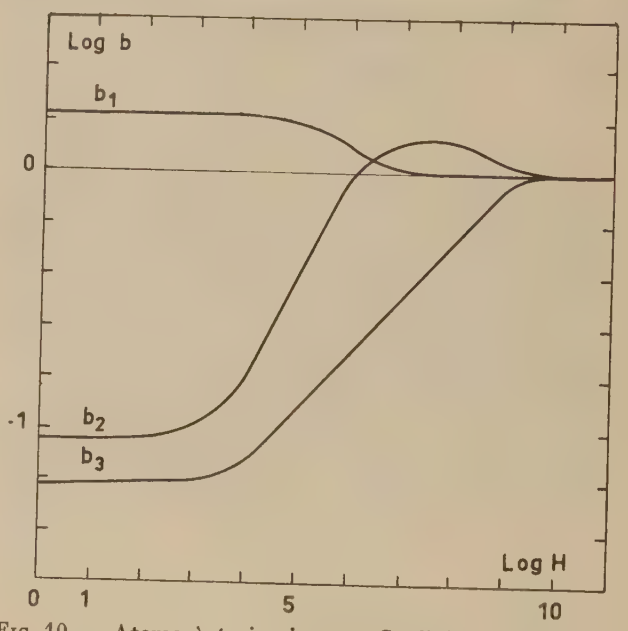

Fig. 10. — Atome à trois niveaux. Coefficients d'écarts à l'E. T.L.
Cas 1. Rayonnement continu à l'E. T. L.

6) *Atome à trois niveaux.*

Les expressions des paramètres des fonctions sources sont compliquées : nous ne les donnerons pas.

Les transitions liées-liées sont déterminées par les processus de photoionisation. En particulier, si dans la zone de profondeur où l'on résout les équations de transfert du rayonnement de Hα, on admet qu'il y a microréversibilité des processus radiatifs des transitions de Lyman, on obtient pour les paramètres N et D de Hα des expressions analogues à celles obtenues pour Lyman α dans le cas d'un atome à deux niveaux.

Nous n'avons utilisé que la méthode itérative suivante : la forme I des équations d'équilibre statistique pour les transitions liées-libres et la forme II pour les transitions liées-liées.

Dans le premier cas traité les rayonnements continus sont en équilibre thermodynamique. On calcule les intensités du rayonnement des trois transitions liées-liées. On obtient la solution à la 8^e itération. Les résultats numériques montrant la convergence dans ce cas ont déjà été publiés. (Cuny, 1964 et 1965).

Les résultats sont portés sur les figures 10 et 11. La remontée de la fonction source de Hα, vers la surface, se produit à des profondeurs où la transition est transparente et est due à l'action de Lyman α et Lyman β.

Dans le second cas on a calculé la solution exacte

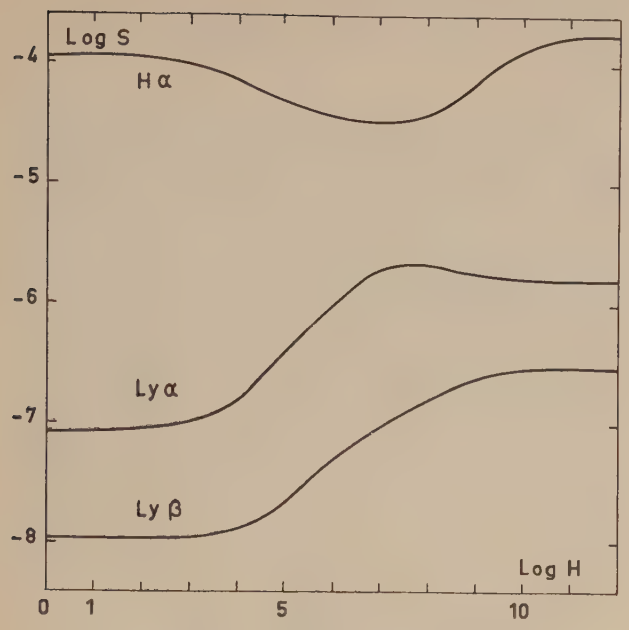

FIG. 11. — Atome à trois niveaux. Fonction source. Cas 1.

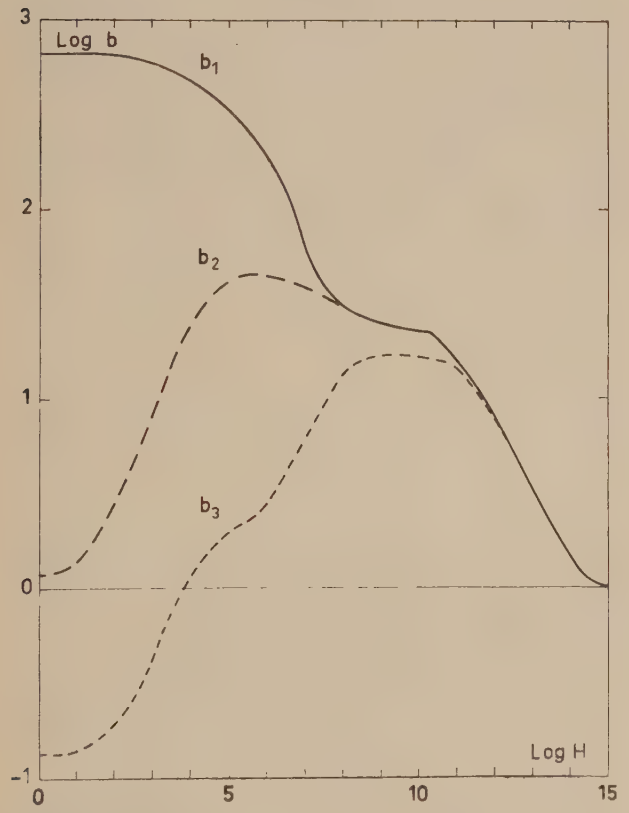

FIG. 12. — Atome à trois niveaux. Coefficient d'écart à l'E. T. L.
Cas 2. Solution exacte du problème du transfert du rayonnement pour les six transitions de l'atome.

du problème du transfert du rayonnement dans les six transitions de l'atome.

La convergence est assez lente : entre la 19e et la

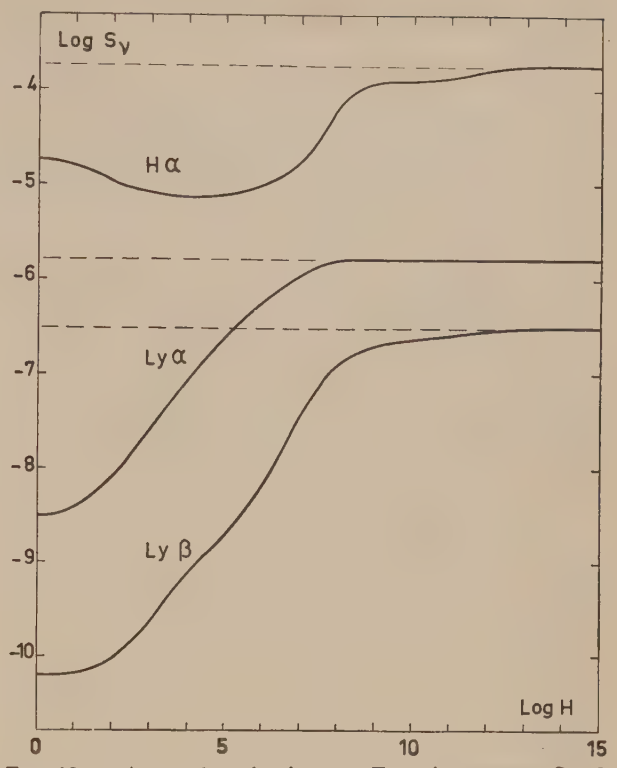

FIG. 13. — Atome à trois niveaux. Fonction source. Cas 2.

20e itération, la variation maximale des coefficients d'écarts à l'équilibre thermodynamique est de 0,4 %. Les figures 12 et 13 donnent les résultats obtenus à la 20e itération.

Sur la figure 12, il est possible de suivre les effets dus aux transitions considérées par ordre d'opacité croissante. Au-delà de H égal à 10^{12} cm il y a microréversibilité pour toutes les transitions à l'excepiont du continu de Paschen ; pour H inférieur à 10^{12} cm il n'y a plus microréversibilité des processus radiatifs de Hα et du continu de Balmer. Les transitions de Lyman commencent à intervenir à la profondeur de 10^8 cm.

7) *Remarques sur le rôle des transitions liées-libres.*

Les valeurs des coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique dépendent de façon importante des termes de photoionisation. Pour s'en convaincre il suffit d'examiner la dernière colonne du tableau IV donnant les résultats obtenus, dans les couches superficielles, pour un atome à deux niveaux, soit avec l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique, soit avec la résolution des équations de transfert du rayonnement pour les transitions liées-libres.

L'étude des différentes transitions faites dans ce chapitre permet d'expliquer facilement les résultats.

En particulier nous avons mis en évidence les points suivants :

a) Les transitions liées-libres sont très importantes. Les valeurs des constantes D des fonctions source des transitions liées-libres montrent qu'on doit les considérer comme aussi importantes que de ortes raies de résonance. Dans le cas d'un atome à deux niveaux les constantes D du continu de Lyman et du continu de Balmer sont respectivement de l'ordre de grandeur de $4\ 10^{-2}$ et $4\ 10^{-4}$.

b) La fonction source des transitions liées-liées dépend des termes de photoionisation. Dans le cas d'un atome à deux niveaux, nous avons vu que N et D, pour Lyman α, sont respectivement proportionnels aux termes de photoionisation P_1 et P_2 du continu de Lyman et du continu de Balmer.

c) De plus il peut y avoir couplage entre les transitions. Toujours dans le cas d'un atome à deux niveaux nous avons vu qu'il y a couplage entre les équations de transfert du rayonnement du continu de Lyman et de Lyman α. A la profondeur où le continu de Lyman devient transparent il n'y a pas microréversibilité des processus radiatifs de Lyman α.

Il est aisé de comprendre pourquoi Johnson et Klinglesmith (1965) d'une part, Avrett et Kalkofen (1965), d'autre part, n'ont pas résolu le problème standard dans les cas où il fallait calculer le rayonnement des transitions liées-libres.

a) Les deux groupes, ne tenant pas compte de l'importance des transitions liées-libres, ont calculé les intensités du rayonnement dans ces transitions en supposant la fonction source connue. Arrivés à un stade des itérations ils calculent la fonction source à l'aide de l'expression donnée par l'équation (55).

Il suffit de considérer l'exemple d'un atome à un niveau pour comprendre que cette méthode ne peut converger. Si l'on prend comme approximation initiale celle donnée par l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique :

$$b_1 = 1,$$

on obtient à la première itération, pour l'intensité moyenne sur une direction, à la surface :

$$y = S/2,$$

d'où :

$$b_1 = 2.$$

Or la solution exacte du problème est :

$$b_1 = 420.$$

Il est probable qu'après quelques centaines d'itérations on doit obtenir une apparence de convergence, sans que celle-ci soit réellement atteinte.

b) D'autre part lorsque les équations de transfert du rayonnement de certaines transitions sont couplées, comme c'est le cas de transitions de Lyman, il faut, soit traiter simultanément les équations de transfert du rayonnement dans ces transitions, soit les traiter séparément, mais en faisant disparaitre la dépendance linéaire des fonctions source de ces transitions, par l'introduction dans les équations d'équilibre statistique du bilan des processus radiatifs des transitions liées-liées ; cette dernière méthode a été utilisée par Johnson et Klinglesmith, mais non par Avrett et Kalkofen.

Conclusion

Nous avons décrit une méthode de détermination des coefficients d'écart à l'équilibre thermodynamique local d'un atome à plusieurs niveaux dans un milieu plan-parallèle semi-infini.

La méthode de résolution des équations de transfert du rayonnement, qui est la méthode de Fox, est facilement applicable, quels que soient les profils d'absorption et d'émission, profils variables avec la profondeur, avec diffusion complètement ou non complètement incohérente, et, le procédé itératif utilisé pour résoudre le problème général converge assez rapidement.

L'exemple traité d'une atmosphère constituée d'hydrogène pur, de densité relativement faible est compliqué par suite du rôle des transitions liées-libres. Dans les applications réelles, le calcul du spectre solaire de l'hydrogène par exemple, les rayonnements continus peuvent être en général calculés avec l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local rendue valable par la haute densité de la photosphère ; le rayonnement du continu de Lyman, qui est chromosphérique, fait exception.

Les prochaines applications traiteront du spectre solaire ; les excellentes observations dont on dispose permettront de contrôler la théorie. Cet article sera suivi d'une étude du spectre solaire de l'hydrogène ; les premiers résultats sont en bon accord avec les observations. Par ailleurs S. Dumont et P. Chamaraux ont obtenu de bons résultats pour le calcium et le sodium.

Manuscrit reçu le 18 *janvier* 1967.

BIBLIOGRAPHIE

[1] Allen C. W., 1955, Astrophysical Quantities, Athlone Press.

[2] Avrett E. H., 1965, Proceedings Second Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, 101.

[3] Avrett E. H., 1966, *Ap. J.*, **144**, 59.

[4] Avrett E. H. and Hummer D. G., 1965, *Month. Not.*, **130**, 296.

[5] Avrett E. H. and Kalkofen W., 1965, Proceedings Second Harvard-Smithsonian Conference on stellar Atmospheres, 249.

[6] Cuny Y., 1964, *C. R.*, **258**, 3192.

[7] Cuny Y., 1965, Proceedings Second Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, 275.

[8] Feautrier P., 1964, *C. R.*, **258**, 3189.

[9] Fox L., 1957, The Numerical Solution of two-point Boundary Problems in Ordinary Differential Equation, Clarendon Press, Oxford.

[10] Jefferies J. T., 1960, *Ap. J.*, **132**, 775.

[11] Jefferies J. T. and Thomas R. N., 1958, *Ap. J.*, **127**, 667.

[12] Jefferies J. T. and Thomas R. N., 1959, *Ap. J.*, **129**, 401.

[13] Jefferies J. T. and Thomas R. N., 1960, *Ap. J.*, **131**, 695.

[14] Johnson H. R. and Klinglesmith D. A., 1965, Proceedings Second Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, 221.

[15] Menzel D., 1937, *Ap. J.*, **85**, 330.

[16] Menzel D., 1962, Selected Papers on Physical Processes in Ionized Plasmas, Dover Publ., New York.

[17] Proceedings Second Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, 1965.

[18] Pottasch S. R. and Thomas R. N., 1959, *Ap. J.*, **130**, 941.

[19] Rybicki G. B., 1965, Proceedings Second Harvard Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, 149.

[20] Thomas R. N., 1948, *Ap. J.*, **108**, 142.

[21] Thomas R. N., 1957, *Ap. J.*, **125**, 260.

[22] Thomas R. N., 1960, *Ap. J.*, **131**, 429.

[23] Thomas R. N., 1965, « Some aspects of Non-equilibrium Thermodynamics in the presence of a Radiation Field », University of Colorado Press, Boulder, Colorado.

[24] Usher P. D., 1964, *Astron. J.*, **69**, 560.

[25] Wachspress E. L., 1960, 126, « Mathematical Methods for Digital Computers » edited by Ralston A. and Wief H. S.

[26] Wrubel M. H., 1963, in « Star Evolution », Enrico Fermi International School of Physics, Course 28, ed. L. Gratton.

Imprimerie Taffin-Lefort, à Lille (France), — Hors-texte : Brunissen, Paris, — *Published in France.*

DEUXIÈME THÈSE

PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ

Les nébuleuses planétaires

Vu et approuvé :
Paris, le 23 Juin 1967
Le Doyen de la Faculté des Sciences,
M. Zamansky.

Vu et permis d'imprimer :
Le Recteur de l'Académie de Paris,
Jean Roche.